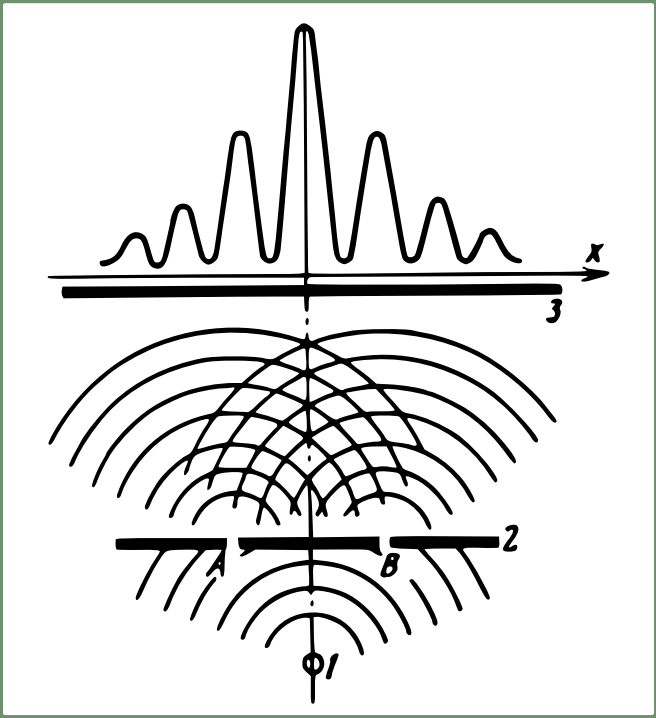
L. Tarassov

PHYSIQUE QUANTIQUE ET OPÉRATEURS LINÉAIRES



Éditions Mir Moscou

Л. В. ТАРАСОВ

ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

ИЗДАТЕЛЬСТВО «ВЫСШАЯ ШКОЛА»
МОСКВА

L. TARASSOV

PHYSIQUE QUANTIQUE ET OPÉRATEURS LINÉAIRES

EDITIONS MIR . MOSCOU

Traduit du russe
par S. MEDVEDEV

на французском языке

© Издательство «Высшая школа», 1978
© Traduction française Editions Mir 1980

AVANT-PROPOS

Quelques remarques préliminaires. Les recherches physiques effectuées à la fin du XIXe siècle et les premières décennies du XXe siècle ont mis en évidence que les lois qui régissent le comportement des microparticules — atomes, électrons, etc. — présentent un caractère très spécifique. C'est sur la base de ces recherches que fut élaborée une nouvelle théorie physique connue sous le nom de *mécanique quantique.*

Le développement de la mécanique quantique fut long et laborieux. On avait réussi assez rapidement à élaborer l'appareil mathématique de la nouvelle théorie (au début des années trente) agrémentée de tout un ensemble de règles établies pour accorder la théorie à l'expérience, mais il a fallu encore plusieurs décennies pour donner une interprétation physico-philosophique de la signification des symboles figurant dans la théorie mathématique. Fock [1] résumait la situation en ces termes: « *L'appareil mathématique de la mécanique quantique non relativiste, libre de toute contradiction interne, était appliqué avec succès à la résolution de différents problèmes de la physique atomique, mais son interprétation physique est restée pendant longtemps imprécise.* »

Les difficultés auxquelles on se heurtait lors de l'interprétation physique de l'appareil de la mécanique quantique étaient loin d'être triviales. La mécanique quantique pose le problème du contenu dialectique des lois nouvelles; or, cela suppose une révision radicale de la liste des questions que le physicien est « habilité à poser à la nature », une révision du rôle que joue le chercheur dans le monde des phénomènes qu'il étudie, cela suppose aussi une nouvelle approche à la question des rapports entre le nécessaire et le contingent et le rejet de nombreux concepts et conceptions devenus usuels. La mécanique quantique se forgeait dans un climat d'âpres discussions et confrontations d'idées, aussi n'est-il pas étonnant qu'y participaient les physiciens les plus éminents: N. Bohr, A. Einstein, M. Planck, E. Schrödinger, M. Born, W. Heisenberg, W. Pauli, A. Sommerfeld, L. De Broglie, P. Ehrenfest, E. Fermi, P. Dirac, R. Feynman, etc.

Il n'est donc pas étonnant qu'aujourd'hui encore tous ceux qui commencent à étudier la mécanique quantique doivent surmonter

une certaine barrière psychologique. Et il s'agit non pas de difficultés d'ordre mathématique, mais bien de celle d'abandonner certaines notions usuelles et un *mode de pensée* induit dans l'esprit par la pratique de la vie quotidienne.

Avant d'entreprendre l'étude de la mécanique quantique, il convient de se faire une idée de la place qu'elle occupe et du rôle qu'elle joue dans la physique moderne. Aussi allons-nous tâcher de répondre *grosso modo* aux trois questions suivantes: Qu'est-ce que la mécanique quantique? Quels sont ses rapports avec la physique classique? A quelles activités professionnelles est-elle indispensable?

Voyons d'abord ce qu'est la mécanique quantique. A cette question on peut répondre de plusieurs façons. Tout d'abord on dira que la mécanique quantique est une théorie physique qui décrit les propriétés de la matière au niveau des *microprocessus*; cette théorie étudie les lois de mouvement des *microparticules*. Les microparticules (molécules, atomes, particules élémentaires) sont les « principaux personnages » de la mécanique quantique.

D'un point de vue plus général, on dira que la mécanique quantique constitue la base théorique des sciences concernant la structure et les propriétés de la matière. La mécanique quantique traite les problèmes relatifs aux propriétés de la matière *à un niveau plus profond* et partant *plus fondamental* que ne le fait la physique classique; de ce fait elle peut répondre à de nombreuses questions concernant les causes de l'apparition de différentes propriétés, auxquelles la physique classique ne pouvait donner de réponse. Pourquoi le diamant présente-t-il une grande dureté? Pourquoi la conductivité électrique d'un semiconducteur croît-elle avec la température? Pourquoi un aimant permanent perd ses propriétés lorsqu'on l'échauffe? A ces questions ainsi qu'à bien d'autres la physique classique ne sait que répondre et on doit alors avoir recours à la mécanique quantique. On doit bien remarquer que la mécanique quantique rend possible le *calcul théorique* de nombreuses propriétés physiques des matériaux. A la question de savoir ce qu'est la mécanique quantique Lamb a répondu de la manière suivante [2]: « *La seule réponse qui soit à la fois simple et facile à comprendre consiste à dire que la mécanique quantique est une science qui met à notre disposition une remarquable collection de règles de calcul de certaines propriétés physiques de la matière.* »

Pour préciser les rapports existant entre la physique classique et la mécanique quantique, on notera tout d'abord que la mécanique quantique constitue un cas limite de la mécanique classique; dès que l'on passe des corps de taille microscopique à des corps macroscopiques, les lois de la mécanique quantique se ramènent aux lois classiques. Ceci conduit parfois à affirmer que la mécanique quantique « fonctionne » dans le microcosme, et la mécanique classique dans le macrocosme. Mais ceci laisserait entendre qu'il existe d'une

part un certain microcosme et d'autre part un certain macrocosme. Or on ne peut parler que de micro-objets (microphénomènes) et de macro-objets (macrophénomènes). Il est essentiel de noter qu'à la base de tout macrophénomène on trouve des microphénomènes et que tout macro-objet est constitué de micro-objets. Il en découle que le passage de la physique classique à la physique quantique correspond non pas au passage d'un « cosme » à un autre, mais à ce qu'on substitue à une étude plus grossière de la matière une étude à un niveau plus profond. Autrement dit, lorsque la mécanique quantique étudie le comportement des micro-objets, elle soumet à l'étude les mêmes corps macroscopiques que la physique classique, mais elle le fait à un niveau plus fondamental. On doit bien remarquer que la frontière entre micro- et macrophénomènes est généralement suffisamment mobile et diffuse. Les conceptions classiques s'avèrent bien souvent utiles pour l'étude des microphénomènes, et les conceptions quantiques rendent service pour l'étude de certains macrophénomènes. On a même créé le terme de « macrophysique quantique » que l'on applique notamment à l'électronique quantique, aux phénomènes de suprafluidité et de superconductibilité, ainsi qu'à différents autres phénomènes.

Quant à la question concernant les domaines techniques où la connaissance de la mécanique quantique est nécessaire, on dira tout d'abord qu'il ne peut s'agir ici que d'écoles d'ingénieurs formant des cadres spécialisés dans trois branches principales : l'*énergétique nucléaire* et l'utilisation pratique des radio-isotopes, la *technologie des matériaux nouveaux*, et enfin l'*électronique*, plus particulièrement l'*électronique des semi-conducteurs* et les *techniques lasers*. En remarquant qu'actuellement n'importe quelle branche de l'économie nationale utilise largement aussi bien les nouveaux matériaux que l'électronique, il s'ensuit qu'on ne saurait former aujourd'hui des ingénieurs de valeur sans une étude poussée de la mécanique quantique.

Structure de l'ouvrage. Ce livre se fixe pour tâche d'initier le lecteur aux notions et aux conceptions de la mécanique quantique, ainsi qu'à l'étude des propriétés physiques qui en découlent. Il s'agit aussi de dégager la logique des idées nouvelles et de montrer comment ces idées nouvelles se laissent incorporer dans l'appareil mathématique des opérations linéaires ; à cet effet, à l'aide d'exemples et de problèmes présentant de l'intérêt pour les élèves ingénieurs, on illustre l'utilisation de cet appareil mathématique.

Ce livre comporte trois chapitres. Dans le *premier chapitre*, en guise d'introduction à la mécanique quantique, on passe en revue les principales particularités de la physique des microparticules ; l'attention du lecteur est attirée sur les idées de base de la quantification et du dualisme et sur les relations d'indétermination. Ce chapitre a pour but de faire entrer dans le « jeu » le « principal person-

nage » qui est la microparticule et de démontrer qu'il est indispensable d'abandonner certaines conceptions de la physique classique.

Le *deuxième chapitre* est consacré aux fondements physiques de la mécanique quantique. On commence par une discussion de tout un ensemble d'expériences fondamentales indispensable pour établir un système de conceptions de la mécanique quantique. L'établissement de ce système se fonde sur le concept d'amplitude de la probabilité de transition. Les règles de mise en œuvre de ce concept d'amplitude de probabilité et de l'interférence de ces amplitudes sont illustrées par différents exemples. Le principe de superposition et le problème de la mesure en mécanique quantique sont également exposés. Tout ceci constitue la première partie de l'exposé des fondements physiques de la théorie. Dans la deuxième partie de cet exposé on analyse, sur la base du concept d'amplitude de probabilité, les questions de causalité. On introduit à cette fin la matrice de Hamilton et on illustre sa mise en œuvre en considérant des microparticules présentant deux états de base, tel le cas de l'électron soumis à l'action d'un champ magnétique extérieur. Le chapitre se termine par des considérations physico-philosophiques.

Le *troisième chapitre* est consacré à la mise en œuvre des opérateurs linéaires dans le cadre de l'appareil mathématique de la mécanique quantique. On présente tout d'abord les notions mathématiques relatives à la théorie des opérateurs linéaires hermitiens et unitaires. On montre ensuite comment procède-t-on pour raccorder les idées physiques et les symboles mathématiques pour transformer l'appareil de la théorie des opérateurs en un appareil de la théorie quantique. Dans ce qui suit on établit sous forme concrète les bases de cet appareil en prenant pour cadre la représentation en coordonnées. Le passage de la représentation en coordonnées à la représentation en impulsion est concrétisé. On considère les trois procédés utilisés pour caractériser l'évolution dans le temps d'un microsystème, correspondant aux conceptions de Schrödinger, de Heisenberg et de Dirac. Pour illustrer la mise en œuvre de l'appareil mathématique, on a recours à des problèmes. Une attention particulière est accordée aux problèmes du mouvement de l'électron dans un champ périodique et du calcul des probabilités des transitions quantiques.

Nous avons incorporé dans le texte des *intermèdes*. Les dialogues de ces intermèdes permettent à l'auteur d'utiliser un style plus décontracté et plus libre pour examiner différentes questions. En utilisant ces intermèdes, l'auteur part de l'idée qu'il ne faut jamais se prendre trop au sérieux même lorsqu'on étudie des problèmes ardus. Et cependant nous recommandons au lecteur d'accorder son attention à ces intermèdes, car ils servent non seulement à le décontracter, mais aussi à l'aider à s'assimiler certains aspects de la théorie dont le sens se dégage bien des dialogues présentés.

Enfin on a disséminé dans ce livre des fragments de textes de savants illustres. L'auteur est persuadé que les citations de textes des fondateurs de la mécanique quantique ont une plus grande portée informatique que n'importe quel autre exposé des idées.

Remarques personnelles. L'auteur tient à exprimer sa profonde gratitude à I. Gourévitch, membre correspondant de l'Académie des sciences de l'U.R.S.S., pour ses entretiens avec l'auteur, dont est sortie l'idée même de ce cours. I. Gourévitch a pris une part active à l'élaboration du plan de ce livre et a bien voulu parcourir le manuscrit. Ce sont ses conseils qui ont déterminé aussi bien la structure que le caractère de l'exposé des matières qui y sont contenues. C'est sous l'influence directe de I. Gourévitch qu'a été écrit l'article « Les idées essentielles de la mécanique quantique » du § 16.

L'auteur voudrait noter l'impression profonde que lui a laissée l'étude des travaux sur la mécanique quantique du physicien américain bien connu R. Feynman [3-5]. En lisant les paragraphes consacrés à la mise en œuvre du concept d'amplitude de probabilité, au principe de superposition, à l'étude de microparticules à deux états de base, le lecteur remarquera que l'approche utilisée est semblable à celle qu'utilisa R. Feynman dans ses *Lectures of Physics.* L'auteur a été profondément impressionné par les travaux de N. Bohr sur la mécanique quantique (surtout le remarquable recueil [6]), de V. A. Fox [1, 7], de W. Pauli [8] et de P. Dirac [9]. Les ouvrages sur la mécanique quantique de L. D. Landau et E. M. Lifchitz [10], de D. I. Blokhintsev [11], de E. Fermi [12] et de L. Schiff [13] ne peuvent manquer d'être mentionnés.

L'auteur tient à adresser ses remerciements au prof. M. I. Podgoretsky qui a donné une analyse précieuse du manuscrit de ce livre. Ses remerciements vont également aux professeurs Y. A. Vdovine, E. E. Lovetsky, G. F. Droukarev, V. A. Diakov, Y. N. Ptchelnikov et au maître de conférences A. M. Poliakov, qui ont pris la peine de lire le manuscrit et de faire des remarques bien appréciées par l'auteur. En conclusion, l'auteur remercie A. N. Tarassova pour tout le soutien et toute l'aide qu'elle a apportés à l'auteur durant la préparation de ce cours.

INTERMÈDE

LE SYSTÈME DES CONCEPTIONS DE LA PHYSIQUE CLASSIQUE EST-IL D'UNE LOGIQUE PARFAITE ?

Personnages : L'Auteur et un vieux physicien de l'école classique (Classique).

AUTEUR : Il est bien connu que le principal contenu de toute théorie physique est un système de conceptions exprimant dans le cadre de chaque théorie les lois objectives de la nature. Examinons, si vous le voulez bien, le système de conceptions se trouvant à la base de la physique classique et essayons de voir si on peut considérer ce système comme parfaitement logique.
CLASSIQUE : Ce système est satisfaisant. Les conceptions de la physique classique ont été formulées en se basant sur une longue expérience humaine et ont résisté à l'épreuve du temps.
AUTEUR : Voudriez-vous en dégager l'essentiel.
CLASSIQUE : J'estime qu'il convient de définir trois aspects fondamentaux. Ce sont : la continuité des variations des grandeurs physiques, le principe du déterminisme classique, la méthode analytique d'étude des objets et des phénomènes. En parlant de *continuité*, nous rappelons qu'à tout instant l'état de l'objet à l'étude se trouve entièrement caractérisé si l'on connaît ses coordonnées et ses vitesses qui sont des fonctions continues du temps. C'est précisément sur cela que se base le concept des trajectoires de mouvement. En principe, on peut considérer des variations d'état aussi petites que l'on veut en réduisant le temps d'observation. Selon le *déterminisme classique*, la connaissance de l'état de l'objet à un instant donné, ainsi que celle de toutes les forces auxquelles il se trouve soumis permettent de prédéterminer avec une précision parfaite l'état de cet objet à tout instant ultérieur. Connaissant, par exemple, à un instant donné la position et la vitesse d'un corps en chute libre, nous pouvons indiquer de façon précise sa position et sa vitesse à tout instant ultérieur, par exemple à l'instant où il atterrit.
AUTEUR : Autrement dit, la physique classique postule une corrélation unique et bien déterminée entre le passé et l'avenir, de même d'ailleurs qu'entre le passé et le présent.
CLASSIQUE : La possibilité d'établir une telle corrélation des événements est parfaitement conforme au caractère continu de la variation des grandeurs physiques : à tout instant nous pouvons répondre simultanément à deux questions — quelles sont les coordonnées de l'objet et à quelle vitesse elles varient. Précisons maintenant l'idée de la *méthode analytique* d'étude des objets et des phénomènes. On a affaire ici à un concept particulièrement important pour tout l'ensemble des conceptions de la physique classique. La physique classique considère que tout corps matériel est formé des parties constituantes qui, tout en étant en interactions mutuelles, peuvent être individuellement soumises à l'étude. Cela signifie tout d'abord que l'objet d'étude peut être *délimité* dans le milieu ambiant et soumis à l'étude comme une entité indépendante, et d'autre part que cet objet peut être, en cas de besoin, *subdivisé* en des parties constituantes dont l'étude permet de déceler sa nature.
AUTEUR : La physique classique ramène donc la question « quelle est la nature d'un objet donné » à celle de savoir « de quoi il est composé ».
CLASSIQUE : C'est tout naturel. Pour apprendre à connaître un dispositif quelconque, il faut le démonter en pièces ne serait-ce que mentalement. D'ailleurs dans notre enfance nous avons procédé à bien des démontages réels. Il en va de même avec les phénomènes naturels : pour apprendre à connaître un phénomène donné, on commence par une analyse dans le temps pour voir la succession de ses différentes étapes.

AUTEUR : Mais toute subdivision porte atteinte à l'intégrité de l'objet ou du phénomène en tant qu'entité.
CLASSIQUE : Dans une certaine mesure, bien sûr. Mais on peut fort bien *évaluer* dans quelle mesure on a porté atteinte à l'intégrité de l'objet à l'étude en tenant compte chaque fois des interactions mutuelles entre les parties constituantes ou des liaisons existant entre les étapes temporaires d'un phénomène. Il peut arriver que l'objet choisi initialement pour l'étude (ou une de ses parties) se modifie notablement dans le temps par suite de ses interactions avec le milieu ambiant (ou par suite des interactions mutuelles de ses différentes parties). Cependant comme les changements qui affectent l'objet de l'étude sont continus, on peut toujours maintenir son individualité pendant un temps indéfini. On ne peut manquer de bien souligner l'existence d'une liaison logique interne entre les trois principales conceptions de la physique classique considérées ci-dessus.
AUTEUR : Quant à moi, je voudrais ajouter qu'une des particularités du « principe d'analyse » réside en ce que la physique classique admet l'absence de toute interdépendance entre l'objet des mesures et les appareils de mesure (ou l'observateur). Dans le cas où c'est l'appareil de mesure qui est lui-même l'objet de l'étude, on peut et on doit les étudier indépendamment l'un de l'autre, c'est-à-dire individuellement.
CLASSIQUE : Ils ne sont pas tout à fait indépendants. Lorsqu'on branche un ampèremètre dans un circuit électrique, celui-ci exerce évidemment une certaine influence sur la valeur de l'intensité de courant mesurée. Il est d'ailleurs facile de calculer l'influence exercée si l'on connaît la résistance électrique de l'ampèremètre.
AUTEUR : Lorsque j'ai parlé de l'indépendance mutuelle de l'objet d'étude et de l'appareil de mesure, j'avais précisément en vue qu'il était possible de calculer cette interaction qui, en ce sens, est « éliminée du problème ».
CLASSIQUE : Là, je suis entièrement d'accord.
AUTEUR : Cette question a été très bien traitée par M. Born [14] : « *On suppose que le monde qui nous est extérieur et qui est l'objet de nos recherches et nous, les individus qui l'observent, qui réfléchissent et font des calculs, sont complètement isolés l'un de l'autre et qu'il existe un moyen d'étudier les phénomènes naturels sans aucune intervention dans leur évolution. Telle est la philosophie de la science qui régnait en maître lorsque nous, les hommes de la vieille génération, étions jeunes. On pourrait qualifier cette manière de voir le style newtonien, puisque le modèle en est la mécanique céleste de Newton.* »
CLASSIQUE : Ce sont là en effet les traits essentiels de la physique classique. Ses conceptions découlent de l'expérience journalière de tous les hommes et on peut le dire sans ambages qu'elles satisfont au bon sens et semblent être parfaitement naturelles. Je dirais même que le « principe d'analyse » est non seulement naturel, mais que c'est la seule méthode d'étude de la matière qui soit efficace. Je n'arrive pas à comprendre comment on pourrait approfondir nos connaissances sur un objet quelconque sans recourir à l'étude de ses différentes parties. En ce qui concerne le principe du déterminisme classique, il reflète la causalité des phénomènes naturels et exprime parfaitement l'esprit même de la physique en tant que *science exacte*.
AUTEUR : Et néanmoins il existe des raisons d'ordre tout à fait général de mettre en doute « l'infaillibilité » des conceptions classiques.

Essayons d'étendre le principe du déterminisme classique à l'Univers tout entier. Nous devrons conclure qu'à un instant donné les positions et les vitesses de tous les « atomes » de l'Univers ont été rigoureusement prédéterminées par leurs positions et leurs vitesses à des instants antérieurs. Ainsi tout ce qui se passe dans l'Univers *serait prédéterminé* et tous les événements se produiront fatalement selon cette prédétermination. En conformité avec les vues de Laplace, on pourrait imaginer un « être suprême » qui connaîtrait exactement le passé et l'avenir. Laplace écrivait [15] : « *Une intelligence qui connaîtrait à un instant donné toutes les forces qui animent la nature et les positions relatives de toutes ses*

parties constituantes et qui, de plus, serait suffisamment vaste pour soumettre à l'analyse l'ensemble de ces données, pourrait résumer en une seule formule les mouvements des plus grands corps de l'Univers ainsi que ceux des atomes les plus légers. Il ne resterait rien qui lui soit incertain et sa vue pénétrerait aussi bien le passé que l'avenir. » On voit que toute vue de l'esprit tendant à étendre le principe du déterminisme classique à toute la nature implique l'idée du fatalisme qui, évidemment, ne correspond absolument pas au bon sens.

Essayons maintenant d'appliquer le « principe de l'analyse» à l'étude de la structure de la matière. Subdivisons mentalement le corps à l'étude en parties de plus en plus petites. Nous aboutirons en fin de compte aux molécules constituant le corps. Le « fractionnement » des molécules nous permettra de conclure que celles-ci sont formées d'atomes, puis, poursuivant nos expériences, nous arriverons au noyau et aux électrons. Cherchant à appliquer encore la méthode d'analyse, nous désirerons découvrir les constituants de l'électron. Puis, si on arrivait à le savoir, on devrait déterminer de quoi sont formés les constituants de l'électron, et ainsi de suite. On ne peut manquer d'arriver à l'idée peu réjouissante que cette suite est infinie, bien que le bon sens en soit révolté. Or cette suite infinie résulte directement de l'esprit de la physique classique.

A différentes époques, on a cherché des solutions au problème de cette suite infinie d'opérations d'analyse. Nous en donnerons deux exemples. Le premier exemple concerne les idées de Platon sur la structure de la matière. Platon affirmait que les quatre constituants de la matière sont: la terre, l'eau, l'air et le feu. A son tour, chacun de ses « éléments » constitutifs est composé d'« atomes » d'une forme géométrique bien déterminée. Les atomes de la terre étaient des cubes, ceux de l'eau des icosaèdres, ceux de l'eau des octaèdres et ceux du feu des tétraèdres. Enfin chacun des atomes pouvait être réduit à un triangle; le triangle étant pour Platon la forme mathématique à la fois la plus simple et la plus parfaite, il ne pouvait donc avoir de constituants. Ainsi Platon a ramené la « suite » dont il est question à un concept purement mathématique—celui de triangle, et imposa une limite à la suite considérée.

L'autre exemple est bien caractéristique pour le début du XXe siècle. Il fait appel à la ressemblance d'aspect purement formelle entre le modèle planétaire de l'atome et le système solaire. On suggère alors que notre système solaire n'est rien d'autre qu'un atome isolé d'un autre monde gigantesque, tandis que l'atome usuel constitue le système solaire d'un monde lilliputien, dans lequel « notre électron » joue le rôle d'une planète. On admet donc une suite infinie de mondes d'une part de plus en plus minuscules et d'autre part de mondes de plus en plus énormes. Dans le cadre d'un tel schéma la structure de la matière se ramène tout bonnement au principe des poupées gigognes s'emboîtant les unes dans les autres. Ce principe, selon lequel la nature utilise la même structure pour bâtir l'infiniment petit et le gigantesque, n'était pas admis unanimement par les physiciens des anciennes générations. Cependant il caractérise bien l'état d'esprit de la physique classique, puisqu'il découle directement du « principe d'analyse ». Langevin faisant la critique des idées de Pascal, écrivait à ce propos [16]: « *Pascal supposait que l'infiniment grand et l'infiniment petit présentaient la même structure. En se plaçant à ce point de vue, nous devrions rencontrer à tous les échelons les mêmes aspects du réel, régis par les mêmes conceptions. L'Univers serait donc semblable aux poupées gigognes s'emboîtant les unes dans les autres, toutes identiques les unes aux autres, mais de dimensions de plus en plus petites. Heureusement la réalité est beaucoup plus riche et beaucoup plus intéressante.* »

Tout ce qui vient d'être dit montre qu'une application conséquente des principes de la physique classique peut conduire dans certains cas à des conclusions qui apparaissent aussitôt comme sujettes à caution. On peut en conclure qu'il doit exister des situations dans lesquelles les principes classiques s'avèrent inapplicables. Ainsi on peut s'attendre à ce qu'à la suite d'une subdivision suffisamment poussée de la matière le principe d'analyse doit devenir inutilisable (et simultanément deviendra faux le principe de l'indépendance de l'objet

des mesures et du dispositif de mesure). Il se peut que dans ces conditions la question « de quoi est constitué l'électron » soit dénuée de sens. S'il en est bien ainsi, nous devons reconnaître que les conceptions classiques qui sont tellement commodes et tellement bien inculquées dans notre esprit ne sont que d'une *validité relative*, et qu'il est nécessaire d'élaborer des concepts qualitativement nouveaux pour décrire le mouvement de la matière. La tendance classique à la subdivision infinie de la matière et au fractionnement dans le temps des phénomènes est le résultat du désir de « surprendre en tout la vie », qui nous a été inculqué pendant des siècles; or à une certaine étape on n'arrive qu'à rompre les liens organiques et il ne reste alors plus rien à surprendre.

CHAPITRE I

LA SPÉCIFICITÉ DE LA PHYSIQUE DES MICROPARTICULES

§ 1. Caractéristiques et propriétés des microparticules

Les microparticules. On entend par microparticules les *molécules*, les *atomes*, les *noyaux atomiques* et les *particules élémentaires*. La liste des particules élémentaires, qui est déjà assez longue, comporte des quanta de champ électromagnétique (les *photons*) et deux groupes de particules — les *hadrons* et les *leptons*. Les hadrons se caractérisent par de fortes interactions (manifestation de forces nucléaires), tandis que les leptons ne participent jamais aux interactions fortes. On trouve dans le groupe des leptons : l'électron, le muon et deux neutrinos — le neutrino électronique et le neutrino muonique. Le groupe des hadrons comporte un plus grand nombre de particules ; ce sont les nucléons (proton et neutron), les mésons (particules dont la masse est plus petite que celle du neutron) et les hypérons (particules dont la masse est plus grande que celle du neutron). A presque toutes ces particules correspondent des *antiparticules*, exception faite du photon et de quelques mésons neutres.

En ce qui concerne les caractéristiques des microparticules, on doit indiquer en premier lieu la *masse de repos* et la *charge électrique*. Indiquons à titre d'exemple que la masse de repos de l'électron est $m = 9{,}1 \cdot 10^{-28}$ g, celle du neutron 1839 m, celle du proton 1836 m et celle du muon 207 m. Dans le groupe des mésons, la masse de repos des pions (mésons π) est approximativement égale à 270 m, celle des kaons (mésons K) est égale à 970 m. La masse de repos du photon et de deux neutrinos est posée égale à zéro.

La masse d'une molécule, d'un atome ou d'un noyau atomique est égale à la somme des masses des particules qui les constituent, déduction faite d'une certaine quantité connue sous le nom de défaut de masse. Le défaut de masse est égal au quotient de l'énergie qu'il faut dépenser pour décomposer la microparticule en ses parties constitutives (c'est l'énergie dite de liaison) par le carré de la vitesse de la lumière. Plus l'énergie de liaison est forte, plus le défaut de masse est important. La liaison la plus forte se manifeste entre les nucléons dans les noyaux atomiques, le défaut de masse rapporté à un nucléon étant supérieur à 10 m.

La charge électrique de n'importe quelle particule est toujours un multiple entier de la charge électronique, qui vaut $1{,}6 \cdot 10^{-19}$ C ($4{,}8 \cdot 10^{-10}$ un. CGSE). A côté de microparticules portant une charge électrique, on trouve des particules neutres (par exemple le photon, le neutrino, le neutron). La charge électrique d'une particule complexe est égale à la somme algébrique des charges des constituants.

Le spin des microparticules. L'une des caractéristiques les plus spécifiques des microparticules est leur *spin*. On peut considérer le spin comme une sorte de moment cinétique propre des microparticules, qui n'est pas lié à leur mouvement d'ensemble (on l'appelle souvent moment cinétique interne des microparticules). Le carré de ce moment cinétique interne vaut $\hbar^2 s(s+1)$. s désigne ici un nombre positif entier ou demi-entier d'une valeur bien déterminée pour chaque espèce de microparticule (c'est précisément ce nombre que l'on désigne d'habitude par le nom de spin) ; $\hbar$ est une constante universelle, qui joue en mécanique quantique un rôle exeptionnel. On l'appelle la *constante de Planck* et elle a pour valeur $1{,}05 \cdot 10^{-34}$ J·s. Le spin s du photon est égal à 1, le spin de l'électron (de même que le spin de n'importe quel autre lepton) vaut 1/2 ; le spin d'un nucléon vaut également 1/2 ; les pions et les kaons n'ont pas de spin *.

Le spin d'une microparticule est sa caractéristique spécifique. On ne connaît pas d'analogue classique du spin et son existence témoigne certainement de la complexité interne des microparticules. Il est bien connu que parfois on essaie d'interpréter la notion de spin à l'aide du modèle d'un corps tournant autour de son axe, c'est-à-dire d'une toupie. (On notera que le mot anglais « spin » signifie « fuseau ».) Ce modèle, bien que concret, est inexact, en ce sens qu'on ne doit pas le prendre à la lettre. L'expression « microparticule tournant sur elle-même », que l'on rencontre dans les publications, désigne non pas une rotation de la microparticule elle-même, mais ne sert qu'à exprimer qu'elle possède un moment cinétique propre. Pour que ce moment cinétique propre se transforme en un moment cinétique classique, il faudrait que $s \gg 1$. Or cette condition n'est généralement pas remplie.

La spécificité du moment cinétique propre d'une microparticule se manifeste notamment en ce que sa projection sur un axe arbitraire ne peut assumer que des valeurs discrètes : $\hbar s$, $\hbar(s-1)$, . . . $-\hbar s$, en tout $2s+1$ valeurs discrètes. Cela signifie que la microparticule peut se trouver dans $2s+1$ états de spin. Par conséquent, l'existence du spin conduit à l'apparition d'un degré de liberté (interne) supplémentaire.

---

* L'existence de spins déterminés chez les microparticules implique que le spin ne dépend pas des conditions externes. Cela est vrai pour les particules élémentaires. Mais dans le cas d'un atome, par exemple, le spin peut varier lorsque l'état de l'atome change. Autrement dit, toute action modifiant l'état de l'atome fait varier son spin.

Les bosons et les fermions. Connaissant la valeur du spin d'une microparticule, on peut prévoir comment elle se comportera au sein d'une collectivité de particules de même espèce (ce qui permet de porter un jugement sur les propriétés statistiques des microparticules d'une espèce donnée). Il s'avère que d'après leur comportement statistique toutes les microparticules connues se laissent classer dans l'un des deux groupes: le groupe des microparticules ayant un spin entier ou dénuées de spin et le groupe de microparticules à spin demi-entier.

Les microparticules du premier groupe peuvent occuper (ou comme on le dit « peupler ») en nombre indéfini un seul et même état *, la probabilité de ce qu'une microparticule vienne occuper un état donné étant d'autant plus grande que la population de cet état est grande. On dit que les microparticules de ce groupe se conforment à la statistique de Bose-Einstein ; on les appelle pour cela des *bosons*. Les microparticules du second groupe ne peuvent occuper les états disponibles qu'individuellement ; si l'état considéré est déjà occupé, aucune autre microparticule ne peut s'y placer. Ces microparticules se comportent conformément à la statistique de Fermi-Dirac, aussi les appelle-t-on des *fermions*.

Parmi les particules élémentaires au groupe des bosons appartiennent les photons et les mésons, et au groupe des fermions les leptons (notamment les électrons), les nucléons et les hypérons. L'appartenance des électrons au groupe des fermions se traduit par le *principe d'interdiction de Pauli*.

Instabilité des microparticules. Exception faite du photon, de l'électron, du proton et des deux neutrinos, toutes les autres particules sont instables. Cela signifie que ces dernières particules se désintègrent spontanément, en donnant d'autres microparticules, sans être soumises à une quelconque action extérieure. Le neutron, par exemple, se désintègre spontanément en donnant un proton, un électron et un neutrino électronique ($n \to p + e^- + \bar{\nu}_e$). Il est impossible de prévoir quand se produira la désintégration d'un neutron donné ; les actes de désintégration sont absolument aléatoires. Cependant, en enregistrant un grand nombre d'actes de désintégration, on arrive à dégager une loi de désintégration. Supposons qu'à l'instant $t = 0$ il y ait N_0 neutrons ($N_0 \gg 1$). A un instant t il subsistera $N(t) = N_0 \exp(-t/\tau)$ neutrons, τ étant une constante caractéristique de la désintégration des neutrons. On l'appelle « durée de vie » du neutron ; elle est égale à 10^3 s. La quantité $\exp(-t/\tau)$ caractérise la probabilité de ce qu'un neutron se désintègre au bout du temps t.

Toutes les espèces de particules instables se caractérisent par des durées de vie qui leur sont propres. Plus celle-ci est courte, plus la

* La notion d'état d'une microparticule est définie au § 3 ci-dessous.

probabilité de désintégration de la particule est grande. La durée de vie des muons est de $2{,}2 \cdot 10^{-6}$ s, celle d'un méson π à charge positive est de $2 \cdot 10^{-8}$ s, celle d'un méson π neutre de 10^{-16} s et celle des hypérons de 10^{-10} s environ. Au cours de ces dernières années on a découvert plus de 100 espèces de microparticules présentant une durée de vie anomalement faible 10^{-22}-10^{-23} s; on les désigne sous le nom de résonances.

Il est remarquable que les hypérons et les mésons peuvent se désintégrer de différentes façons. Ainsi, par exemple, un méson π à charge positive peut se désintégrer en donnant soit un muon et un neutrino muonique ($\pi^+ \rightarrow \mu^+ + \nu_\mu$), soit un positon (antiélectron) et un neutrino électronique ($\pi^+ \rightarrow e^+ + \nu_e$) soit enfin un méson π neutre, un positon et un neutrino électronique ($\pi^+ \rightarrow \pi^0 + e^+ + \nu_e$). En prenant un méson π donné, on ne peut prévoir ni l'instant de sa désintégration, ni la réaction de désintégration qu'il « choisira ».

L'instabilité est la propriété non seulement des particules élémentaires mais aussi d'autres microparticules. Le phénomène de radioactivité (transformation spontanée d'isotopes en un autre élément s'accompagnant d'une émission de particules élémentaires) montre que les noyaux atomiques peuvent être instables. A l'état excité les atomes et les molécules peuvent être eux aussi instables: ils passent spontanément de cet état excité à l'état normal ou bien à un état d'excitation plus faible.

L'instabilité, caractérisée par les lois de probabilité, est après le spin la deuxième propriété spécifique des microparticules. On peut considérer qu'elle témoigne, elle aussi, d'une structure interne complexe des microparticules.

Remarquons, pour conclure, que l'instabilité est une propriété spécifique, mais nullement obligatoire, des microparticules. A côté de microparticules instables on en trouve beaucoup qui sont stables, tels le photon, l'électron, le proton, le neutrino, les noyaux atomiques stables, ainsi que les atomes et les molécules se trouvant dans leur état fondamental.

Transmutation des microparticules. Lorsqu'un lecteur non averti examine le schéma de désintégration du neutron ($n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e$), il peut penser que le neutron est constitué par un proton, un électron et un antineutrino électronique qui sont liés entre eux. Or, une telle supposition est erronée. La désintégration d'une microparticule n'est pas une simple décomposition en ses constituants, c'est un processus de *transformation* de la particule initiale en plusieurs autres particules: la particule initiale se trouve détruite et à sa place naissent de nouvelles particules. L'incorrection du terme « désintégration d'une particule » apparaît dès que l'on remarque que nombreuses sont les particules qui se désintègrent selon plusieurs schémas différents.

Le tableau des transmutations mutuelles des particules élémentaires devient beaucoup plus fourni et varié si l'on prend en ligne de compte non seulement les particules se trouvant à l'*état libre*, mais aussi celles qui sont dans des états *liés*. Le proton libre est stable, tandis que le neutron libre se désintègre suivant le schéma que nous avons donné ci-dessus. Mais si l'on prend un neutron et un proton non pas à l'état libre mais dans un noyau atomique où ils sont liés, la situation devient toute autre. On a alors affaire aux schémas suivants des transmutations: $n \to p + \pi^-$, $p \to n + \pi^+$ (π^- est le symbole d'un méson π portant une charge négative qui est l'antiparticule du méson π^+). Ces schémas montrent bien qu'il est absolument inutile d'essayer de voir si le proton est « partie intégrante » du neutron ou au contraire si c'est le neutron qui est un « constituant » du proton.

L'expérience de tous les jours nous enseigne que démonter un objet en ses parties constitutives c'est apprendre à connaître les éléments de sa *structure*. Le principe d'analyse (de subdivision) reflète un des aspects caractéristiques des conceptions classiques. Lorsqu'on passe à l'étude des microparticules, ce principe reste encore, dans une certaine mesure, valable: la molécule est composée d'atomes, l'atome est composé d'un noyau et d'électrons, le noyau — de neutrons et de protons. Cependant, au-delà, le principe de subdivision cesse de fonctionner: une « subdivision » de neutrons ou de protons ne révèle aucune structure interne. Ayant affaire à des particules élémentaires, *on ne peut plus* affirmer: « La particule se décompose en telles et telles particules, et donc elle se compose de ces particules-là. »

Les *désintégrations* des particules élémentaires sont loin d'épuiser toutes les possibilités de leurs transmutations. Les transmutations qui se produisent lors de la *collision* de particules sont fort nombreuses. A titre d'exemple, indiquons quelques schémas de transmutations se produisant lors de la collision des neutrons et des protons avec des photons (γ):

$$\gamma + p \to n + \pi^+, \qquad \gamma + n \to p + \pi^-,$$
$$\gamma + p \to p + \pi^0, \qquad \gamma + n \to n + \pi^0,$$
$$\gamma + p \to p + \pi^+ + \pi^-,$$
$$\gamma + n \to n + \pi^0 + \pi^0,$$
$$\gamma + p \to p + p + \bar{p} \ (\bar{p} \text{ — antiproton}).$$

Nous attirons l'attention du lecteur sur ce que dans tous ces schémas la somme des masses de repos des particules formées est plus grande que la somme des masses de repos des particules initiales. Autrement dit, l'énergie des particules qui entrent en collision se transforme en masse (selon la relation bien connue $E = mc^2$. Ces

schémas démontrent aussi qu'il est illusoire d'essayer de réaliser la fission des particules élémentaires (dans le cas considéré, des nucléons) en les bombardant par d'autres particules (dans notre cas par des photons); il se produit alors non pas une fission des particules bombardées, mais l'apparition de nouvelles particules dont la naissance s'effectue dans une certaine mesure aux dépens de l'énergie des particules entrant en collision.

L'étude des transmutations des particules élémentaires a permis de dégager certaines lois qui les régissent. Ces lois sont des lois de conservation de certaines grandeurs caractérisant les particules. L'exemple le plus simple en est la charge électrique des particules. Lors de n'importe quelle transmutation des particules, les sommes algébriques des charges électriques des particules initiales et finales sont égales entre elles. La loi de conservation de la charge électrique reflète une des lois de transformation mutuelle des particules; elle permet d'exclure *a priori* les schémas de transformation où la somme des charges électriques ne se conserve pas.

Un autre exemple, plus compliqué, est celui des charges dites baryoniques des particules. On a observé que lors des transformations des particules le nombre des nucléons se conserve. Lorsqu'on a découvert l'existence des antinucléons on a constaté que la naissance de nouveaux nucléons n'est possible que si elle s'accompagne de la naissance d'antinucléons. On a introduit alors la notion de charge baryonique qui est égale à zéro pour les photons, les leptons et les mésons, à l'unité pour les nucléons et à moins un pour les antinucléons. L'introduction de la charge baryonique a permis d'interpréter les résultats observés à l'aide de la loi de conservation de la charge baryonique des particules. La validité de cette loi a été confirmée par les études ultérieures; on a été amené à attribuer aux hypérons nouvellement découverts une charge baryonique égale à $+1$ (comme pour les nucléons) et aux antihypérons une charge égale à -1 (comme pour les antinucléons).

Les constantes dynamiques universelles. Lorsqu'on passe de l'étude de corps macroscopiques à celle de microparticules, on doit s'attendre à ce que les réponses aux questions suivantes deviennent toutes autres: quelles sont les variables dynamiques qui caractérisent l'état des corps à l'étude? comment doit-on décrire leur mouvement? Les réponses que l'on donne à ces questions permettent de dégager dans une large mesure les caractères spécifiques de la physique des microparticules.

En physique classique on utilise *les lois de conservation de l'énergie, de l'impulsion et du moment cinétique*. Il est bien connu que ces lois résultent de certaines propriétés de symétrie de l'espace et du temps. Ainsi la loi de conservation de l'énergie est une conséquence de l'*homogénéité du temps* (l'évolution des processus physiques ne dépend pas du choix de l'origine du temps); la loi de conservation de l'impulsion est une conséquence directe de l'*homogénéité de l'espace* (tous les points de l'espace sont physiquement équivalents); la loi de conservation du moment cinétique résulte du *caractère isotrope de l'espace*

(toutes les directions spatiales sont physiquement équivalentes). Pour préciser la spécificité des propriétés de symétrie de l'espace et du temps, nous noterons que grâce à ces propriétés les lois de Kepler décrivant le mouvement des planètes autour du Soleil sont indépendantes de la position du Soleil dans la galactique, de l'orientation dans l'espace du plan dans lequel se déplace une planète donnée ainsi que du moment de la découverte de ces lois. L'existence d'une corrélation entre les propriétés de symétrie de l'espace et du temps et les lois de conservation qui en découlent signifie que l'énergie, l'impulsion et le moment cinétique peuvent être considérés comme des *intégrales de mouvement*, dont la conservation résulte respectivement de l'homogénéité du temps, de l'homogénéité de l'espace et de son caractère isotrope.

Comme il n'existe aucun fait expérimental qui indiquerait que dans les microphénomènes ces propriétés de l'espace et du temps ne seraient pas valables, on est conduit à conclure que les variables dynamiques telles que l'énergie, l'impulsion et le moment cinétique doivent conserver toute leur signification pour l'étude des microparticules. Cela signifie que l'existence de liens entre ces variables dynamiques et les propriétés fondamentales de symétrie de l'espace et du temps permet de considérer ces variables comme des variables dynamiques universelles, valables quels que soient les phénomènes physiques considérés.

Cependant lorsqu'on transpose les concepts d'énergie, d'impulsion et de moment cinétique de la physique classique à la mécanique quantique, on doit tenir compte de toutes les particularités des microparticules. Rappelons à ce propos les formules bien connues de l'énergie (E), de l'impulsion ($\vec{p}$) et du moment cinétique ($\vec{M}$) d'un corps matériel classique de masse m, de coordonnée $\vec{r}$ et de vitesse $\vec{v}$:

$$E = \frac{mv^2}{2} + U(\vec{r}), \quad \vec{p} = m\vec{v}, \quad \vec{M} = m(\vec{r} \times \vec{v}). \tag{1.1}$$

En excluant la vitesse, nous en tirons des corrélations entre l'énergie, l'impulsion et le moment cinétique d'un corps matériel classique:

$$E = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r}), \tag{1.2}$$

$$\vec{M} = (\vec{r} \times \vec{p}). \tag{1.3}$$

Si l'on considère une microparticule, on doit remarquer ici, reportant les considérations détaillées au § 3, que les relations (1.2) et (1.3) lui sont inapplicables. Cela signifie que les corrélations classiques entre les intégrales de mouvement cessent d'être valables lorsqu'on passe à l'étude des microparticules (quant aux équations (1.1) il ne peut plus en être question vu que la notion de vitesse

d'une microparticule n'a pas de sens, comme nous le verrons ci-dessous). Nous nous trouvons donc en présence d'un résultat qualitativement nouveau.

Pour mettre en évidence d'autres résultats qualitativement différents de ceux de la physique classique, nous devons faire usage des deux concepts fondamentaux de la mécanique quantique: le concept de *quantification des grandeurs physiques* et celui du *dualisme onde-corpuscule*.

§ 2. Deux concepts fondamentaux de la mécanique quantique

Le concept de la quantification (du caractère discret). L'idée de la quantification réside en ce que certaines grandeurs physiques caractérisant la microparticule ne peuvent assumer dans des conditions appropriées que des valeurs *discrètes* et bien déterminées. On dit que ces grandeurs physiques *sont quantifiées*.

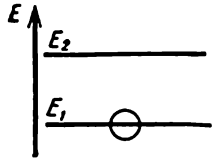


Fig. 2.1

C'est ainsi que l'énergie de toute microparticule se trouvant à l'état lié est quantifiée; un exemple en est la quantification de l'énergie des électrons d'un atome. Par contre, l'énergie d'une microparticule en mouvement libre n'est pas quantifiée.

Supposons que l'on étudie l'énergie d'un électron appartenant à un atome. A l'ensemble des valeurs discrètes de l'énergie de l'électron est associé un système de *niveaux d'énergie*. Considérons deux niveaux d'énergie E_1 et E_2 représentés fig. 2.1 (l'énergie de l'électron est portée le long de l'axe des coordonnées). L'électron peut avoir ou bien l'énergie E_1 ou bien l'énergie E_2, mais jamais une énergie de valeur intermédiaire entre E_1 et E_2; toutes les valeurs de l'énergie satisfaisant aux inégalités $E_1 < E < E_2$ lui sont interdites *. On notera que le caractère discret de l'énergie ne signifie nullement que l'électron est astreint à rester indéfiniment dans son état énergétique initial (par exemple, sur le niveau E_1). L'électron peut passer sur un autre niveau (le niveau E_2 ou un autre encore) s'il absorbe ou émet la quantité d'énergie correspondant à leur différence. Une telle transition d'un niveau à un autre est appelée *transition quantique*.

L'idée du caractère discret des grandeurs physiques introduite par la mécanique quantique possède une longue histoire. Dès la fin du XIXe siècle il avait été établi que les spectres d'émission d'atomes libres sont *cannelés* (sont constitués par un ensemble de raies) et

* On peut aussi avoir affaire à une situation propre à la mécanique quantique où l'on devra admettre que l'électron occupe simultanément les deux niveaux E_1 et E_2 (cf. § 10).

comportent des raies caractéristiques de chaque élément qui forment des groupes ordonnés (des *séries de raies*). En 1885 on avait découvert que l'hydrogène atomique émettait des radiations de fréquences ω_n (on utilise ici et dans ce qui suit les fréquences circulaires ω, qui sont liées aux fréquences usuelles ν par la relation $\omega = 2\pi\nu$), qui sont déterminées par la formule

$$\omega_n = 2\pi c R \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2}\right), \tag{2.1}$$

n sont les nombres entiers 3, 4, 5, . . . ; c est la vitesse de la lumière, R — la *constante de Rydberg* ($R = 1{,}097 \cdot 10^7$ m^{-1}). La formule (2.1) a été établie par Balmer, aussi est-il devenu usuel de désigner l'ensemble des fréquences correspondant à cette formule sous le nom de *série de Balmer*. Les fréquences de la série de Balmer correspondent à la partie visible du spectre. Au début du XXe siècle on a découvert d'autres séries de fréquences d'émission de l'hydrogène atomique, correspondant aux régions ultraviolette et infrarouge du spectre. On a constaté que la structure de ces séries obéissait à la même loi que celle décrivant la série de Balmer, ce qui a permis de généraliser la formule (2.1) en l'écrivant sous la forme

$$\omega_n = 2\pi c R \left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2}\right). \tag{2.2}$$

Le nombre k caractérise la série ; pour chacune des séries on a $n > k$; $k = 2$ — série de Balmer, $k = 1$ — *série de Lyman* (région ultraviolette du spectre), $k = 3$ — *série de Paschen* (région infrarouge), etc.

On a décelé des régularités de structure non seulement dans le spectre de l'hydrogène atomique, mais également dans les spectres d'émission d'autres atomes. L'existence de ces régularités de structure démontre la possibilité de généraliser l'ensemble de ces résultats. En 1908 Ritz a avancé en qualité d'une telle généralisation son *principe de combinaison* : « *Disposant des formules décrivant les séries et des valeurs des constantes qui y figurent, on peut déduire la position dans le spectre de toute raie nouvellement découverte des positions des raies antérieurement connues en formant les sommes et les différences de leurs fréquences.* » Appliquons ce principe au spectre de l'hydrogène. Etablissons pour différentes valeurs de n ce que l'on appelle les *termes spectraux* :

$$T(n) = 2\pi c R / n^2.$$

N'importe quelle fréquence d'émission figurant dans le spectre de l'hydrogène se laisse alors exprimer sous forme d'une combinaison de deux termes spectraux. En combinant les termes spectraux connus, on arrive à prédire les différentes fréquences possibles.

Il est intéressant de noter qu'à la même époque l'idée du caractère discret des grandeurs physiques commençait à percer dans un tout autre domaine n'ayant rien de commun avec la spectroscopie des atomes; il s'agissait en l'occurrence de l'étude du rayonnement renfermé à l'intérieur d'une enceinte fermée, ce qu'il est convenu d'appeler le *rayonnement du corps noir*. En 1900, Planck, à la suite d'une analyse des données expérimentales, formula une hypothèse qui est devenue célèbre. Il supposa que l'énergie du rayonnement électromagnétique était émise par les parois de l'enceinte non pas de façon continue, mais par de petites portions (des quanta), l'énergie d'un quantum étant égale à

$$E = \hbar\omega, \tag{2.3}$$

ω est la fréquence de la radiation et $\hbar$ une constante universelle (c'est ainsi que fut introduite dans la physique la constante de Planck). Il est bien connu que l'hypothèse de Planck a permis de concilier la théorie avec l'expérience et de surmonter notamment les difficultés que connaissait l'ancienne théorie dans le domaine des fréquences élevées et que l'on désignait sous le terme de « catastrophe de l'ultraviolet » (cf. par exemple [17]).

Le concept de quantification et le modèle de l'atome d'hydrogène de Bohr. En 1913 N. Bohr développe une théorie de l'atome d'hydrogène. Cette théorie était le résultat d'une synthèse entre le modèle planétaire de l'atome suggéré par Rutherford, du principe de combinaison de Ritz et de l'idée de la quantification de l'énergie émise par Planck.

Selon la théorie de Bohr, l'atome peut se trouver dans des états où il ne peut émettre de radiations (*états* dits *stationnaires*); l'énergie de ces états forme un spectre *discret*: E_1, E_2, . . ., E_n. L'atome ne peut émettre ou absorber un rayonnement que lorsqu'il effectue une *transition* d'un état stationnaire à un autre, l'énergie émise (ou absorbée) étant alors égale à la différence des énergies des états stationnaires concernés. Lors de la transition d'un état d'énergie E_n à un état de plus petite énergie E_k, l'atome émet un quantum de lumière d'énergie $(E_n - E_k)$ et on voit apparaître dans son spectre d'émission une raie dont la fréquence est

$$\omega = \frac{E_n - E_k}{\hbar} \tag{2.4}$$

La formule (2.4) exprime la fameuse *règle des fréquences* de Bohr.

Dans la théorie de Bohr, au n-ième état stationnaire de l'atome d'hydrogène correspond une orbite circulaire de rayon r_n le long de laquelle l'électron effectue son mouvement autour du noyau. Pour le calcul de r_n Bohr a utilisé d'une part la deuxième loi de Newton appliquée au mouvement d'une charge le long d'une orbite circulaire

sous l'action d'une force coulombienne

$$m\frac{v_n^2}{r_n}=\frac{e^2}{r_n^2} \tag{2.5a}$$

(m et e sont respectivement la masse et la charge de l'électron et v_n sa vitesse sur la n-ième orbite), et d'autre part la condition de quantification du moment cinétique de l'électron

$$mv_nr_n = n\hbar. \tag{2.5b}$$

A l'aide de (2.5a) et (2.5b) on trouve aisément r_n et v_n :

$$r_n=\frac{\hbar^2}{me^2}n^2, \quad v_n=\frac{e^2}{\hbar n}. \tag{2.6}$$

L'énergie E_n d'un état stationnaire se compose de l'énergie cinétique (T_n) et de l'énergie potentielle (U_n): $E_n = T_n + U_n$. En posant $T_n = mv_n^2/2$ et $U_n = -e^2/r_n$, on tire de (2.6)

$$E_n=-\frac{me^4}{2\hbar^2n^2}. \tag{2.7}$$

La valeur négative de l'énergie signifie que l'électron se trouve dans un état lié (on adopte pour le zéro l'énergie d'un électron libre).

En substituant (2.7) dans (2.4) et en identifiant le résultat obtenu à la formule (2.2), on arrive à trouver, comme l'a fait Bohr, une expression de la constante de Rydberg:

$$R=\frac{me^4}{4\pi c\hbar^3}. \tag{2.8}$$

La théorie de Bohr (ou comme on l'appelle aujourd'hui l'« ancienne théorie quantique ») était marquée par des contradictions internes: ainsi on était obligé d'utiliser pour le calcul du rayon de l'orbite des relations de nature essentiellement différentes — la relation classique (2.5a) et la relation « quantique » (2.5b). Néanmoins cette théorie a joué un rôle important, étant *le premier pas* vers l'élaboration d'une théorie quantique conséquente. La théorie de Bohr a permis d'interpréter pour la première fois la nature des termes spectraux (et partant de fonder le principe de combinaison des fréquences de Ritz) et de donner un procédé de calcul de la valeur de la constante de Rydberg ; la valeur de celle-ci est en excellent accord avec sa valeur empirique. Les succès de la théorie témoignaient de la justesse du concept de quantification. Lorsque Sommerfeld prit connaissance des calculs de Bohr, il lui écrivit une lettre où il disait notamment [18] : « *Je vous remercie de m'avoir fait connaître Vos si intéressants résultats. Depuis longtemps je m'intéresse au problème de trouver une expression de la constante de Rydberg en fonction de la constante de Planck. Bien qu'en ce moment je reste encore sceptique chaque fois qu'il s'agit d'un modèle d'atome, je dois reconnaître que le calcul de cette constante est un véritable exploit.* »

La quantification du moment cinétique. Remarquons tout d'abord qu'à la différence de l'énergie le moment cinétique d'une microparticule est toujours quantifié. Ainsi, par exemple, les valeurs mesurées du carré du moment cinétique d'une microparticule s'expriment par une formule telle que

$$M^2 = \hbar^2 l\,(l + 1), \tag{2.9a}$$

l étant des nombres entiers 0, 1, 2, . . . Lorsqu'il s'agit du moment cinétique de l'électron d'un atome se trouvant dans le n-ième état stationnaire, le nombre l prend toutes les valeurs entières comprises entre zéro et $n - 1$.

Dans la littérature scientifique au lieu d'écrire « moment cinétique d'une microparticule » on écrit, pour abréger, *moment* d'une microparticule. Nous nous conformerons à cet usage dans ce qui suit.

La projection du moment d'une microparticule sur une direction arbitrairement choisie (désignons-la par z) peut prendre les valeurs suivantes

$$M_z = \hbar m, \tag{2.9b}$$

avec $m = -l, -l + 1, \ldots, l - 1, l$. Le nombre l ayant une valeur donnée, le nombre m assume $2l + 1$ valeurs discrètes. Il importe de bien remarquer que les différentes projections du moment d'une microparticule sur un seul et même axe diffèrent toujours entre elles d'un multiple entier de la constante de Planck.

Nous avons déjà indiqué que le spin est une sorte de moment interne propre à la microparticule, dont la valeur dépend de l'espèce de la microparticule. Pour établir une distinction avec le moment *de spin*, le moment usuel est désigné sous le nom de moment *orbital*. Du point de vue de la cinématique, le moment de spin est analogue au moment orbital; aussi est-il tout naturel que pour déterminer les différentes projections du moment de spin on utilise une formule semblable à la formule (2.9b) (comme pour le moment orbital, les différentes projections du moment de spin diffèrent entre elles de quantités égales à un multiple entier de la constante de Planck). Si on désigne par s le spin d'une microparticule (nous avons introduit ce nombre au § 1), les projections du moment de spin prennent des valeurs égales à $\hbar\sigma$, avec $\sigma = -s, -s + 1, \ldots, s - 1, s$. Par exemple, les projections du spin de l'électron ont pour valeurs $-\hbar/2$ et $\hbar/2$.

Les nombres n, l, m, σ qui déterminent les valeurs discrètes des variables dynamiques quantifiables (dans le cas considéré, de l'énergie et du moment) sont usuellement appelés *nombres quantiques*. Plus précisément, on appelle: n — nombre quantique *principal*, l — nombre quantique *orbital*, m — nombre quantique *magnétique*, σ — nombre quantique *de spin*. Il existe encore d'autres nombres quantiques.

Les contradictions inhérentes aux transitions quantiques. Malgré tous les succès enregistrés par la théorie de Bohr, le concept de quantification paraissait douteux ; on avait remarqué en effet que ce concept était entaché de contradictions internes. Dans une lettre adressée à Bohr Rutherford écrivait (en 1913) [19] : « *Vos idées concernant les origines du spectre de l'hydrogène sont très astucieuses et paraissent solidement étayées. Cependant la combinaison des idées de Planck et de la mécanique classique a suscité de grandes difficultés lorsque j'analysais Votre hypothèse et je suppose que Vous Vous en rendez bien compte. Ces difficultés concernent la question suivante : comment l'électron peut-il savoir à quelle fréquence il doit osciller lorsqu'il passe d'un état stationnaire à un autre ? Il me semble que Vous êtes obligé de supposer que l'électron sait par avance où il viendra atterrir.* » *

Voyons de plus près quelle est la difficulté invoquée par Rutherford. Soit un électron occupant le niveau E_1 (fig. 2.1) ; pour qu'il puisse passer sur le niveau E_2 l'électron doit absorber un quantum de rayonnement (un photon) d'une énergie bien déterminée, égale à $E_2 - E_1$. S'il absorbe un photon d'une autre énergie, il ne pourra pas effectuer la transition considérée, qui devient donc impossible (pour simplifier, nous ne considérons que deux niveaux d'énergie). On est alors conduit à se poser la question : comment l'électron arrive-t-il à « choisir » le photon « convenable » dans le flux de photons de différentes énergies ? Pour pouvoir faire ce « choix », l'électron doit connaître l'existence du second niveau, ce qui présuppose qu'il doit y avoir été. Mais pour qu'il puisse aller sonder ce second niveau il doit commencer par absorber le photon ayant l'énergie requise. On se trouve donc pris dans un cercle vicieux.

On révèle d'autres contradictions lorsqu'on considère le saut de l'électron d'une orbite de l'atome sur une autre. Aussi rapide que soit le passage de l'électron d'une orbite d'un rayon donné sur une orbite d'un autre rayon, ce passage s'effectue pendant un intervalle de temps fini (s'il n'en était pas ainsi on se trouverait en contradiction avec la condition fondamentale de la théorie de la relativité). Mais on ne peut savoir alors quelle doit être l'énergie de l'électron durant cet intervalle de temps, puisqu'il ne se trouve plus sur l'orbite où son énergie était E_1 et il n'est pas encore arrivé sur l'orbite où son énergie doit être égale à E_2.

Il n'est donc pas étonnant qu'à l'époque on a cherché à interpréter les résultats expérimentaux sans avoir recours à l'idée de quantification. A ce propos nous citerons la remarque bien connue de Schrödinger, qui lui échappa lors d'un débat : « *Si nous voulons conserver*

* Le lecteur ne doit pas s'étonner de trouver ici le terme « oscillation » de l'électron ; en effet, le mouvement uniforme le long d'une orbite circulaire est le résultat de la superposition de deux oscillations harmoniques dans deux plans rectangulaires.

ces damnées transitions quantiques, je regrette d'avoir eu affaire à la théorie quantique! » Cependant l'inexorable expérience témoignait constamment en faveur de la quantification et aucune autre alternative ne s'offrait.

Dans une telle situation il ne restait qu'une seule issue : introduire des idées nouvelles, qui, de concert avec l'idée de la quantification, constituerait un schéma théorique libre de toute contradiction interne. La nouvelle idée dont on avait besoin était l'idée du dualisme onde-corpuscule.

Le concept du dualisme onde - corpuscule. La physique classique nous apprend à connaître deux modes de mouvement : le mouvement *corpusculaire* et le mouvement *ondulatoire*. Le premier est caractérisé par ce que le corps en mouvement est localisé dans l'espace, ainsi que par l'existence d'une trajectoire de mouvement bien définie. Le deuxième mode de mouvement se caractérise, par contre, par une délocalisation spatiale en ce sens que l'on n'associe aucun corps localisé à la propagation d'une onde, celle-ci étant le mouvement d'un certain milieu. Au niveau des phénomènes macroscopiques, les mouvements corpusculaires et ondulatoires sont nettement délimités ; il n'y a rien de commun entre une pierre lancée en l'air et le mouvement d'une onde battant la berge.

Ces conceptions usuelles et concrètes ne se laissent cependant pas transposer dans le domaine de la mécanique quantique. Au niveau des phénomènes microscopiques, la distinction nette entre les deux mouvements qui existe à l'échelle macroscopique s'estompe largement, et le mouvement d'une microparticule présente *simultanément* des caractères corpusculaires et ondulatoires. Si l'on considère, tout schématiquement d'ailleurs, les corpuscules et les ondes classiques comme deux cas extrêmes du mouvement de la matière, on devra situer les microparticules quelque part au milieu de ce schéma. Les microparticules ne sont ni de vraies particules classiques ni de véritables ondes, dans le sens classique de ce terme, elles sont qualitativement différentes et de l'une et de l'autre. On peut dire qu'une microparticule ressemble dans une certaine mesure à un corpuscule et dans une certaine mesure à une onde ; la mesure de cette ressemblance dépend notamment des conditions dans lesquelles elle se trouve. Tandis qu'en physique classique les notions de corpuscule et d'onde sont des entités opposées, l'une excluant totalement l'autre (on a affaire soit à un corpuscule, soit à une onde), au niveau du phénomène microscopique ces entités opposées se trouvent dialectiquement unies dans la microparticule. C'est cet état de choses qu'il est convenu d'appeler le *dualisme onde-corpuscule*.

Initialement le concept du dualisme a été appliqué au rayonnement électromagnétique. Dès 1917 Einstein a proposé de considérer les quanta introduits par Planck comme des espèces de *particules* possédant non seulement une énergie bien déterminée, mais encore

une impulsion déterminée :

$$E = \hbar\omega, \quad p = \frac{\hbar\omega}{c}. \tag{2.10}$$

Par la suite (en 1923) on a commencé à désigner ces particules sous le nom de *photons*.

Les propriétés corpusculaires du rayonnement se sont manifestées d'une manière particulièrement nette dans les expériences de Compton (*effet Compton*, 1923). Soit un faisceau de rayons X, qui est diffusé par les atomes d'un corps. Selon les conceptions classiques, les rayons diffusés devraient avoir la même longueur d'onde que celle du faisceau incident. Or, l'expérience montre que la longueur d'onde du rayon diffusé est plus grande que la longueur d'onde initiale, la différence des longueurs d'ondes dépendant de l'angle de diffusion. On a réussi à interpréter l'effet Compton en supposant que le faisceau de rayons X se comporte comme un flux de photons, subissant des collisions élastiques avec les électrons des atomes ; ces collisions sont telles que les lois de la conservation de l'énergie et de l'impulsion sont respectées pour les particules entrant en collision. La théorie qui a été développée était en excellent accord qualitatif et quantitatif avec l'expérience (cf. [17]).

En 1924 De Broglie a proposé d'étendre l'idée de la dualité non seulement aux rayonnements, mais à toutes les microparticules quelles qu'elles soient. Plus concrètement, il proposa d'attribuer à toutes les microparticules, d'une part, des *caractéristiques corpusculaires* (énergie E et impulsion p) et d'autre part, des *caractéristiques ondulatoires* (fréquence ω et longueur d'onde λ). Le lien entre ces deux types de propriétés caractéristiques est assuré, selon De Broglie, par la constante de Planck conformément aux relations

$$E = \hbar\omega, \quad p = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} \tag{2.11}$$

(la seconde relation est connue sous le nom de *formule de De Broglie*). Pour les photons, les relations (2.11) sont automatiquement satisfaites si on porte dans (2.10) $\omega = 2\pi c/\lambda$. L'hypothèse de De Broglie était extrêmement hardie puisqu'elle supposait que les relations (2.11) étaient applicables non seulement aux photons, mais à toutes les microparticules, en particuler à celles possédant une masse de repos et qui étaient de ce fait assimilées à des corpuscules.

En 1927 l'hypothèse de De Broglie a été confirmée par l'expérience : on a mis en évidence l'existence de la *diffraction des électrons*. Lors d'une étude du passage des électrons à travers de minces feuilles métalliques, Davisson et Germer (ainsi que Tartakovsky) ont observé sur l'écran de détection des anneaux de diffraction. Vis-à-vis des ondes électroniques le réseau cristallin de la cible a joué le rôle d'un réseau de diffraction. Ayant mesuré les distances de séparation des anneaux de diffraction produits par des électrons d'une énergie donnée, on a constaté la justesse de la formule de De Broglie.

En 1949 une équipe soviétique dirigée par Fabrikant a effectué une expérience intéressante. Ils faisaient passer à travers un disposi-

tif de diffraction un faisceau d'électrons tellement faible que l'intervalle de temps s'écoulant entre le passage de deux électrons consécutifs était plus de 10^4 fois plus grand que le temps de passage d'un électron à travers le dispositif de diffraction. Dans ces conditions on pouvait être certain que le comportement d'un électron donné n'était pas affecté par la présence d'autres électrons. Ces expériences ont montré qu'après un temps d'exposition suffisamment long pour que l'écran détecteur puisse enregistrer un nombre suffisamment grand d'électrons, le diagramme de diffraction obtenu était identique à celui que l'on obtenait avec le faisceau électronique usuel. On en a conclu que les propriétés ondulatoires des électrons ne pouvaient être attribuées à un quelconque effet collectif ; chacun des électrons pris séparément présente des propriétés d'onde.

Rôle joué par la constante de Planck. Le concept de quantification conduit à celui du caractère discret des grandeurs physiques ; or, pour révéler ce caractère discret il est nécessaire de fixer une *échelle de grandeur* convenable. Le rôle de cette échelle de grandeur est assumé par la constante de Planck. On peut dire que la valeur de cette constante établit une « frontière » entre les phénomènes micro- et macroscopiques. A l'aide de la constante de Planck, de la masse et de la charge de l'électron, on arrive à établir un rapport simple ayant la dimension d'une longueur :

$$r_1 = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0{,}53 \cdot 10^{-8} \text{ cm}. \tag{2.12}$$

Remarquons que r_1 est le rayon de la première orbite de la théorie de Bohr. Conformément à (2.12), on peut considérer qu'une longueur de l'ordre de 10^{-8} cm peut être adoptée en qualité de limite supérieure des dimensions spatiales où évoluent les phénomènes microscopiques. Les dimensions de l'atome sont précisément de cet ordre de grandeur.

Si, toutes les choses restant égales d'ailleurs, la valeur de la constante $\hbar$ avait été, par exemple, cent fois plus grande, cela aurait signifié que, conformément à (2.12), la « limite » supérieure du domaine des microphénomènes se situait à 10^{-4} cm. Dans ce cas les microphénomènes seraient beaucoup plus proches de l'échelle à laquelle nous nous sommes habitués, et les atomes seraient plus gros. Autrement dit, les grains de matière se seraient trouvés plus grossiers et on aurait dû remanier les conceptions classiques à partir de dimensions plus grandes.

Nous avons déjà indiqué que les différentes projections du moment d'une microparticule diffèrent entre elles d'un multiple entier de $\hbar$ (cf. (2.9b)). Par conséquent, la constante de Planck représente ici un *pas de quantification*. Si le moment orbital est beaucoup plus grand que $\hbar$, on peut négliger sa quantification, et on aboutit au moment cinétique classique. A la différence du moment orbital, le moment de spin ne peut être suffisamment grand pour pouvoir négliger

sa quantification ; il en découle qu'il n'a pas d'analogue classique (nous avons déjà relevé ce fait au § 1).

La constante de Planck est intimement liée non seulement au concept de quantification, mais tout aussi bien à celui de la dualité. Il s'ensuit de (2.11) que cette constante y joue un rôle des plus importants en ce qu'elle sert de « lien » entre les propriétés corpusculaires et ondulatoires d'une microparticule. Ce rôle particulier de la constante de Planck apparaît nettement en écrivant les équations (2.11) sous une forme laissant apparaître le caractère vectoriel de l'impulsion :

$$E = \hbar\omega, \quad \vec{p} = \hbar\vec{k}. \tag{2.13}$$

$\vec{k}$ est le vecteur d'onde ; sa direction coïncide avec la direction de propagation de l'onde, tandis que sa valeur s'exprime en fonction de la longueur d'onde : $k = 2\pi/\lambda$. Les premiers membres des équations (2.13) renferment les caractéristiques corpusculaires de la microparticule et les seconds membres ses caractéristiques ondulatoires. Notons encore que la forme des relations (2.13) témoigne de l'invariance relativiste du concept de dualité.

Nous voyons donc qu'en mécanique quantique la constante de Planck sert à deux fins essentielles : fixer l'échelle du caractère discret des grandeurs en cause et unifier les aspects corpusculaire et ondulatoire du mouvement de la matière. Le fait que ce double rôle est assumé par une seule et même constante confirme implicitement l'unité interne des deux idées de base de la mécanique quantique.

Remarquons pour conclure que la présence dans n'importe quelle formule de la constante de Planck implique que cette formule est de nature quantique *.

§ 3. Les relations d'incertitude

La dualité et les relations d'incertitude. Considérons un ensemble d'un grand nombre d'ondes planes (quelle qu'en soit la nature) se propageant le long de l'axe x, par exemple. Supposons que les fréquences de ces ondes sont comprises dans un intervalle $\Delta\omega$, et les valeurs du vecteur d'onde dans un intervalle Δk_x. Si on superpose ces ondes planes, on obtient une formation spatialement délimitée que l'on appelle un *paquet d'onde* (fig. 3.1). L'étalement du paquet d'onde dans l'espace (Δx) et dans le temps (Δt) est donné par les rela-

* L'affirmation inverse est, par contre, fausse. Il serait incorrect, bien qu'on le fasse parfois, de ramener toute « l'essence » de la mécanique quantique à l'existence de la constante de Planck (voir à ce propos [51]).

tions :

$$\left.\begin{aligned}\Delta\omega\Delta t &\gtrsim 1,\\ \Delta k_x\Delta x &\gtrsim 1,\end{aligned}\right\} \tag{3.1}$$

Ces relations sont bien connues en physique classique. Le lecteur qui connaît la radiotechnique sait bien que pour obtenir un signal mieux localisé il faut utiliser un plus grand nombre d'ondes planes de différentes fréquences. Autrement dit, pour rendre Δx et Δt petits, il faut augmenter Δk_x et $\Delta\omega$.

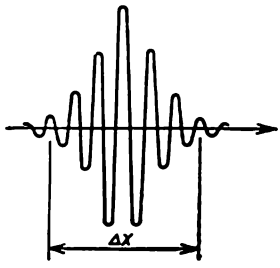


Fig. 3.1

Laissons maintenant de côté le paquet d'onde et postulons tout formellement que les relations (3.1) sont valables non seulement pour les ondes classiques mais plus généralement pour les caractéristiques ondulatoires d'une microparticule. Nous voudrions souligner expressément qu'en faisant cette hypothèse nous n'entendons nullement utiliser le paquet d'onde comme un modèle de notre microparticule. En considérant les grandeurs ω et k_x figurant dans (3.1) comme des *caractéristiques ondulatoires* de la microparticule et en faisant appel aux relations (2.13), on arrive aisément à déduire des expressions analogues pour les *caractéristiques corpusculaires* de la microparticule (son énergie et son impulsion) :

$$\Delta E\Delta t \gtrsim \hbar, \tag{3.2}$$

$$\Delta p_x\Delta x \gtrsim \hbar. \tag{3.3}$$

Ces relations ont été initialement établies en 1927 par Heisenberg. On les désigne sous le nom de *relations d'incertitude*.

En plus des relations (3.2) et (3.3), on utilise encore une troisième relation d'incertitude

$$\Delta M_x\Delta\varphi_x \gtrsim \hbar, \tag{3.4}$$

où $\Delta\varphi_x$ est l'indétermination sur la coordonnée angulaire de la microparticule (il s'agit d'une rotation autour de l'axe x) et ΔM_x est l'indétermination sur la valeur de la projection du moment sur l'axe x *.

Par analogie avec (3.3) et (3.4), on peut établir des relations d'incertitude pour les autres projections du moment et de l'impulsion sur

* Notons que les inégalités (3.4.) et (3.4a) ne sont vérifiées que tant que l'indétermination sur la valeur de la coordonnée angulaire ($\Delta\varphi \ll 2\pi$) est petite, ce qui revient à exiger que la projection du moment soit grande.

les deux autres axes:

$$\Delta p_y \Delta y \gtrsim \hbar, \quad \Delta p_z \Delta z \gtrsim \hbar, \tag{3.3a}$$

$$\Delta M_y \Delta \varphi_y \gtrsim \hbar, \quad \Delta M_z \Delta \varphi_z \gtrsim \hbar. \tag{3.4a}$$

Signification des relations d'incertitude. Examinons la relation (3.3). Δx représente l'incertitude sur la valeur de la coordonnée x et Δp_x l'incertitude sur la valeur de la projection sur l'axe x de son impulsion. Plus Δx est petit, plus Δp_x est grand et inversement. Si la particule est localisée en un point déterminé x, l'incertitude sur la valeur de la projection sur l'axe x de son impulsion sera indéfiniment grande. Si, par contre, la valeur p_x d'une microparticule est bien déterminée, la position de la microparticule sur l'axe x est parfaitement indéterminée.

On interprète parfois la relation d'incertitude (3.3) de la manière suivante: on ne peut mesurer simultanément la coordonnée de position et l'impulsion d'une microparticule avec la même précision. Plus la précision d'une mesure de la coordonnée est grande, moins sera précise la mesure de l'impulsion. Cette interprétation n'est pas très satisfaisante, puisqu'on peut en conclure que toute la signification de la relation (3.3) se réduit aux limites qu'elle fixe à la précision des mesures. On peut alors admettre que la microparticule possède bien une certaine coordonnée de position et une certaine impulsion, mais que la relation d'incertitude rend impossible leur mesure simultanée.

En fait la situation réelle est bien différente. C'est la microparticule elle-même qui ne peut avoir simultanément une coordonnée de position et une projection de son impulsion bien déterminées. Si la particule se trouve, par exemple, dans un état caractérisé par une position mieux définie, dans cet état-là la projection correspondante de son impulsion sera beaucoup moins bien définie. Il en découle alors tout naturellement qu'il est pratiquement impossible d'effectuer une mesure simultanée des coordonnées et des impulsions des microparticules. C'est une conséquence du caractère spécifique des microparticules et non un jeu de la Nature en vertu duquel on ne saurait étendre nos connaissances à tout ce qui existe. La signification de la relation (3.3) réside non pas en ce qu'elle dresse des obstacles sur la voie de la connaissance des microphénomènes, mais en ce qu'elle reflète certaines particularités des propriétés objectives des microparticules. Cette dernière remarque a une portée tout à fait générale et concerne non seulement la relation (3.3), mais aussi toutes les autres relations d'incertitude.

Examinons maintenant plus exhaustivement la relation (3.2). Il existe deux interprétations légèrement différentes mais convergentes de cette relation. Supposons que notre microparticule est instable; soit Δt sa durée de vie dans l'état considéré. Dans cet état l'incertitude ΔE sur la valeur de son énergie est liée à la durée de vie Δt par la relation (3.2). Dans le cas particulier où l'état considéré

est stationnaire (Δt indéfiniment grand) l'énergie de la microparticule a une valeur parfaitement déterminée ($\Delta E = 0$).

L'autre interprétation de la relation (3.2) se rapporte aux mesures qui ont pour objet de préciser si la microparticule occupe le niveau E_1 ou le niveau E_2. Pour effectuer une telle mesure, on doit disposer d'un temps T qui dépend de la différence entre les énergies de ces niveaux $(E_2 - E_1)$:

$$(E_2 - E_1)\, T \gtrsim \hbar. \tag{3.2a}$$

On décèle aisément le lien qui existe entre ces deux interprétations. Pour arriver à une discrimination en énergie des niveaux E_1 et E_2 il faut que l'incertitude ΔE sur l'énergie de la microparticule soit inférieure à la distance en énergie des niveaux concernés: $\Delta E \lesssim (E_2 - E_1)$. Simultanément, la durée T de la mesure ne doit évidemment pas excéder la durée de vie Δt de la microparticule occupant un niveau donné: $T \lesssim \Delta t$. Les conditions extrêmes dans lesquelles la mesure est encore réalisable sont donc de la forme:

$$\Delta E \approx E_2 - E_1, \quad T \approx \Delta t.$$

A l'aide de (3.2) on aboutit à (3.2a).

Les relations d'incertitude (3.2)-(3.4) montrent de quelle manière nous devons utiliser les notions d'énergie, d'impulsion et de moment cinétique lorsque nous passons à l'étude des microparticules. On en déduit une particularité très importante de la physique des microparticules: l'énergie, l'impulsion et le moment d'une microparticule conservent leur signification, mais dans des limites imposées par les relations d'incertitude. Heisenberg écrivait à ce propos [20]: « *Nous ne pouvons pas interpréter les phénomènes à l'échelle atomique de la même manière que dans le cas de processus à l'échelle macroscopique. Lorsque nous utilisons les concepts habituels, leur domaine de validité est limité par les relations d'incertitude.* »

On ne doit cependant pas perdre de vue que la signification des relations d'incertitude ne se réduit pas uniquement à une limitation de l'application aux microparticules des notions classiques de coordonnée, d'impulsion, d'énergie, etc. Il serait erroné de ne voir que leur « contenu négatif » et de négliger leur important « contenu positif ». Les relations d'incertitude représentent l'instrument de travail de la théorie quantique. Reflétant les caractères spécifiques de la physique des microparticules, elles permettent d'arriver par des procédés simples à des estimations de grande valeur. Nous donnerons au § 4 des exemples d'estimations obtenues à l'aide des relations d'incertitude.

De l'étude du phénomène de diffraction des microparticules aux relations d'incertitude. La voie que nous avons utilisée jusqu'ici pour introduire les relations d'incertitude peut paraître trop formelle et peu concrète. Il existe maints procédés d'établissement

des relations d'incertitude (voir par exemple [21]). L'un de ces procédés [directement applicable à établir la relation (3.3)] est basé sur l'analyse du phénomène de diffraction des microparticules.

Supposons (fig. 3.2) que sur le trajet d'un faisceau rigoureusement parallèle de microparticules d'une espèce donnée d'impulsion p, on dispose un écran dans lequel on a pratiqué une fente étroite; soit d la largeur de cette fente dans la direction x (l'axe x est perpendiculaire à la direction du faisceau incident). Lors de leur passage à travers la fente, les microparticules sont diffractées. Soit θ l'angle que forme la direction du faisceau incident avec la direction pointant vers le premier pic de diffraction. Selon la théorie ondulatoire classique cet angle est défini par la relation : $\sin\theta = \lambda/d$. En supposant que l'angle θ est petit, cette relation s'écrit

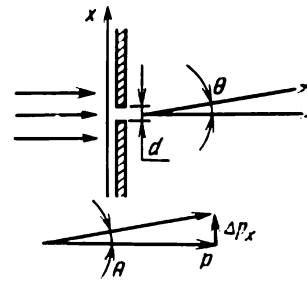


Fig. 3.2.

$$\theta \approx \frac{\lambda}{d}. \qquad (3.5)$$

Si maintenant on entend par λ non plus la longueur d'une onde classique, mais celle d'une onde de De Broglie (donc une des caractéristiques ondulatoires de la microparticule), on peut, en utilisant (2.11), écrire (3.5) en termes de grandeurs « corpusculaires » :

$$\theta \approx \frac{\hbar}{pd}. \qquad (3.5a)$$

Usant d'un « langage » corpusculaire, comment expliquer l'existence même de l'angle θ ? On peut dire que l'existence de cet angle de diffraction signifie que la microparticule acquiert lors de son passage à travers la fente une certaine impulsion Δp_x, dirigée suivant l'axe x. Il est facile de voir que $\Delta p_x \approx p\theta$. En y substituant (3.5a), il vient $\Delta p_x \approx \hbar/d$. En considérant la largeur d comme l'incertitude Δx sur la valeur de la coordonnée x de la microparticule qui passe au travers de la fente, nous obtenons aussitôt $\Delta p_x \Delta x \approx \hbar$, donc la relation d'incertitude (3.3). Ceci montre que toute tentative de fixer dans une certaine mesure la coordonnée de la microparticule le long d'une direction perpendiculaire à sa direction de propagation fait aussitôt apparaître une incertitude sur son impulsion le long de cette même direction, et c'est précisément ce qui détermine le phénomène de diffraction que l'on observe expérimentalement.

Les relations d'incertitude et les états des microparticules; notion de l'ensemble complet de grandeurs physiques. On sait que pour définir l'*état* d'un corps classique on doit indiquer un certain ensemble de nombres caractérisant ses coordonnées et les composantes de sa

vitesse. En procédant ainsi, on définit en même temps d'autres grandeurs telles que l'énergie, l'impulsion, le moment cinétique du corps considéré [voir (1.1)]. Les relations d'incertitude montrent bien que ce procédé de définition de l'état est inutilisable pour les microparticules. Si par exemple la microparticule possède une valeur déterminée de la projection de l'impulsion sur un axe donné, on en infère que sa position le long de ce même axe ne peut être déterminée de façon univoque: selon (3.3) l'incertitude sur la coordonnée de position sera indéfiniment grande. Un électron se trouvant au sein d'un atome possède une énergie bien déterminée, tandis que ses coordonnées de position sont incertaines aux dimensions linéaires de l'atome près; or cela entraîne, conformément à (3.3), que l'incertitude sur les valeurs des projections de l'impulsion de l'électron est égale au quotient de la constante de Planck par les dimensions linéaires de l'atome.

Nous pouvons énumérer plusieurs considérations qui ont une grande importance pour la mécanique quantique et qui résultent des relations d'incertitude. Ce sont: a) les différentes variables dynamiques caractérisant la microparticule sont groupées dans des ensembles de grandeurs pouvant avoir *simultanément* des valeurs *déterminées* (pouvant donc être simultanément mesurées); de tels ensembles sont dits *ensembles complets* de grandeurs; b) les différents états d'une microparticule forment des groupes d'états; chaque groupe est caractérisé par un ensemble complet de grandeurs physiques, et renferme des états pour lesquels ces grandeurs ont des valeurs bien déterminées (on dit généralement qu'*à chaque ensemble complet de variables dynamiques correspond son propre mode de fixation des états*).

Donnons quelques exemples d'ensembles complets utilisés pour caractériser les états d'une microparticule, par exemple d'un photon ou d'un électron. Chaque ensemble complet comporte quatre grandeurs (on dit alors que la microparticule, photon ou électron, possède quatre *degrés de liberté*). Pour caractériser les différents états d'un électron, on utilise les ensembles suivants:

$$x,\ y,\ z,\ \sigma, \tag{3.6a}$$

$$p_x,\ p_y,\ p_z,\ \sigma, \tag{3.6b}$$

$$E,\ l,\ m,\ \sigma \tag{3.6c}$$

(rappelons que l, m, σ représentent respectivement les nombres quantiques orbital, magnétique et de spin). On notera que les coordonnées et les composantes de l'impulsion de la microparticule (dans le cas considéré, de l'électron) appartiennent à des ensembles complets différents; les grandeurs physiques appartenant à un des ensembles complets ci-dessus peuvent être déterminées (mesurées) simultanément. C'est la raison pour laquelle les relations classiques (1.2)

et (1.3) deviennent inutilisables lorsqu'on passe à l'étude de microparticules : chacune de ces formules renferme aussi bien les coordonnées que les impulsions.

L'ensemble complet (3.6b) est utilisé pour décrire les états d'un électron en mouvement libre : l'énergie de l'électron libre est elle aussi déterminée : $E = (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)/2m^*$. Quant à l'ensemble (3.6c), on l'utilise pour décrire les états de l'électron lié à un atome.

Pour décrire les états du photon, on utilise le plus souvent les ensembles suivants :

$$k_x,\ k_y,\ k_z,\ \alpha, \tag{3.7a}$$

$$E,\ M^2,\ M_z,\ P. \tag{3.7b}$$

k_x, k_y, k_z sont les trois projections du vecteur d'onde du rayonnement ; α est la polarisation du photon, M^2 et M_z représentent l'un le carré du moment et l'autre la projection du moment du photon ; P est un nombre quantique appelé parité spatiale. Remarquons que dès que les projections du vecteur d'onde du rayonnement sont déterminées, on connaît les projections de l'impulsion du photon (puisque $\vec{p} = \hbar k$). La *polarisation* du photon peut prendre deux valeurs, en conformité avec les deux polarisations indépendantes d'une onde classique (on peut parler, par exemple, d'une polarisation elliptique droite des photons). La *parité spatiale* est une autre caractéristique spatiale des microparticules ; on peut la considérer comme une intégrale de mouvement, dont la conservation résulte de la symétrie de réflexion dans un miroir. Nous examinerons dans ce qui suit (§ 20) cette question plus en détail, et nous noterons ici que la parité peut prendre deux valeurs : $P = 1,\ -1$.

L'ensemble (3.7a) est utilisé pour décrire les états des photons correspondants aux ondes *planes* classiques ; simultanément se trouve déterminée l'énergie des photons (puisque $E = \hbar\omega = \hbar ck$). Les états décrits par l'ensemble (3.7a) sont dits états $k\alpha$. L'ensemble (3.7b) est utilisé pour décrire les états des photons correspondants aux ondes *sphériques* classiques. Notons que de même que toute onde sphérique peut être conçue comme une superposition d'ondes planes, l'état d'un photon décrit par l'ensemble (3.7b) peut être représenté sous forme d'une « superposition » d'états définis par l'ensemble (3.7a). On peut tout aussi bien représenter une onde plane sous forme d'une superposition d'ondes sphériques. Nous ne faisons qu'effleurer ici l'un des plus importants et délicats aspects de la description de la matière par les procédés de la mécanique quantique — celui de la spécificité des « corrélations » entre les états d'une microparticule qui sont décrits par des ensembles complets *différents*. Ce caractère spécifique de la théorie quantique se révèle dans l'un des principes

* A la différence de la formule (1.2), la relation classique $E = p^2/2m$ relative à un corps en mouvement libre reste valable pour les microparticules.

les plus utiles de la théorie — *le principe de la superposition des états.* Nous examinerons en détail le principe de la superposition des états au chapitre II.

Les relations d'incertitude et les transitions quantiques. Les contradictions dont il a été question au § 2 au sujet des transitions quantiques sont pratiquement levées dès que l'on fait intervenir le concept de dualité, ou plus précisément lorsqu'on met en œuvre les relations d'incertitude (3.2). Supposons que nous ayons affaire à une transition d'un électron dans un atome du niveau E_1 au niveau E_2, résultant de l'absorption d'un photon ayant une énergie $\hbar\omega = E_2 - E_1$. Rappelons que les contradictions inhérentes aux transitions étaient liées à la question : qu'est-ce qui se produit d'abord — l'absorption d'un photon ou la transition de l'électron ? Maintenant la question n'a plus de sens. Effectivement, si aussi bien avant qu'après interaction avec le rayonnement on a affaire à un électron lié possédant soit l'énergie E_1 soit l'énergie E_2, lors de l'interaction avec le rayonnement on se trouve en présence d'*un seul système quantique* comportant aussi bien l'électron que le rayonnement. Ce système existe pendant un temps *fini* (correspondant à la durée de l'interaction avec le rayonnement) et, d'après (3.2), on ne peut lui attribuer aucune énergie déterminée. Il est par suite dénué de sens de chercher à préciser ce qui se passe dans le système. Lors de l'interaction de l'électron avec les photons, on ne peut en toute rigueur discerner l'électron du photon, ceux-ci constituant *un tout unique* ; et c'est ce système unique dont les détails nous importent peu que nous devons prendre en considération. Cet exemple montre bien qu'en mécanique quantique on ne peut détailler indéfiniment dans le temps les processus physiques à l'étude. La question de la succession des événements dans un microphénomène ne s'impose pas toujours *.

La mise en œuvre des relations d'incertitude (3.2) permet d'introduire la notion des transitions dites *virtuelles*, qui joue dans la théorie quantique un rôle des plus importants ; cette notion peut être notamment utilisée pour l'étude des transitions quantiques. Nous nous contenterons de donner ici un bref aperçu sur les transitions virtuelles reportant à plus tard (§ 6) leur étude détaillée. Selon la relation (3.2), l'électron peut passer du niveau E_1 sur le niveau E_2 même sans apport extérieur d'énergie, à condition qu'il revienne rapidement sur le niveau E_1. Un tel aller-retour ($E_1 \to E_2 \to E_1$) n'est possible que si la durée Δt satisfait à l'inégalité $\hbar/\Delta t > (E_2 - E_1)$, puisque alors l'incertitude sur la valeur de l'énergie de l'électron est plus grande que la différence d'énergie des deux niveaux. Il en résulte que l'expression « l'électron se trouve sur le niveau E_1 » peut être interprétée comme une succession continue de « transitions » de l'électron du niveau considéré sur d'autres niveaux, à condition toutefois qu'après chaque transition il revienne sur le niveau d'origine E_1. Comme on ne peut déceler ces transitions par l'expérience, on les appelle, à la différence des transitions usuelles (qui sont réelles), des transitions virtuelles. Lorsqu'un électron qui effectue des transitions virtuelles entre en interaction avec un rayon-

* La « contradiction » des transitions quantiques se trouve automatiquement levée dès que l'on fait intervenir le principe de la superposition des états (cf. § 10).

nement, il peut changer de « domicile » et venir s'installer sur le niveau E_2, par exemple ; dorénavant il effectuera ses transitions virtuelles à partir du niveau E_2 (et non plus à partir de E_1). On dira alors que l'électron a absorbé un photon d'énergie $\hbar\omega = E_2 - E_1$ et a transité sur le niveau E_2. Les transitions virtuelles n'exigent aucun apport d'énergie extérieure, tandis que les transitions réelles exigent un apport d'énergie qui est l'énergie des photons absorbés (ou émis) par les électrons lors de leur interaction avec le rayonnement.

Pour rendre plus claire la distinction entre les transitions réelles et les transitions virtuelles, remarquons qu'une transition réelle d'un niveau E_1 à un niveau E_2 et en sens inverse peut être subdivisée en deux étapes temporelles consécutives (on peut fixer par l'expérience l'état intermédiaire de l'électron, lorsque celui-ci se trouve sur le niveau E_2) ; par contre, une transition virtuelle $E_1 \to E_2 \to E_1$ ne peut être subdivisée en étapes, car on doit considérer que la transition aller et retour est un processus unique indissociable dans le temps.

La relation d'incertitude entre le nombre de photons et leur phase. En mécanique quantique on utilise encore d'autres relations d'incertitude que celles décrites par les relations (3.2)-(3.4). A titre d'exemple nous examinerons la relation d'incertitude reliant le nombre de photons et la phase de l'onde.

Soit un rayonnement monochromatique de fréquence ω. Ce rayonnement peut être considéré d'une part comme une collectivité de photons ayant chacun une énergie $\hbar\omega$, et d'autre part comme une onde électromagnétique classique. Soit N le nombre de photons renfermés dans un certain volume, et soit $\Phi = \omega t$ la phase de l'onde classique. La caractéristique corpusculaire du rayonnement (nombre de photons N) et la caractéristique ondulatoire (phase Φ) ne peuvent avoir simultanément des valeurs bien déterminées, car elles sont liées par la relation d'incertitude suivante

$$\Delta N \Delta \Phi \gtrsim 1. \tag{3.8}$$

Pour établir cette relation, nous partirons de la relation d'incertitude pour l'énergie et le temps. Rappelons que pour mesurer l'énergie d'un système quantique à ΔE près, on doit disposer d'un temps $\Delta t \gtrsim \hbar/\Delta E$. Si le système quantique considéré est une collectivité de photons, on doit avoir

$$\Delta E = \hbar\omega \Delta N,$$

où ΔN est l'incertitude sur le nombre de photons. Pendant le temps Δt requis pour effectuer une mesure de l'énergie à $\hbar\omega\, dN$ près, la phase Φ du système à l'étude aura varié de $\Delta\Phi = \omega\Delta t$. En portant dans cette dernière équation la relation $\Delta t \gtrsim \hbar/\hbar\omega\Delta N$, on obtient $\Delta\Phi \gtrsim 1/\Delta N$, ce qu'il fallait démontrer.

La relation (3.8) reflète l'unité dialectiquement contradictoire des propriétés corpusculaires et ondulatoires du rayonnement. L'incertitude $\Delta\Phi$ sera petite lorsque les propriétés ondulatoires se manifestent nettement ; dans ce cas la densité de photons doit être grande (N grand), ce qui implique que l'incertitude ΔN le sera aussi. Par contre, l'incertitude ΔN sera petite lorsque la collectivité comporte

peu de photons, mais dans ce cas ce sont les propriétés corpusculaires du rayonnement qui prédominent et l'incertitude $\Delta\Phi$ sur la phase sera grande.

§ 4. Quelques résultats qu'impliquent les relations d'incertitude

Estimation de l'énergie de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène. Les relations d'incertitude permettent d'arriver à des estimations utiles par des procédés simples et représentent de ce fait un *instrument de travail* apprécié de la mécanique quantique.

En qualité de premier exemple considérons un *atome d'hydrogène à l'état fondamental.* Utilisons l'expression classique bien connue de l'énergie d'une particule chargée se mouvant dans un champ coulombien

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r}, \tag{4.1}$$

m et e sont la masse et la charge de l'électron. Pour pouvoir utiliser cette expression classique dans la théorie quantique, nous considérerons les grandeurs p et r comme les incertitudes sur les valeurs de l'impulsion et de la coordonnée de position de l'électron. Selon la relation (3.3) ces grandeurs sont interconnectées. Posons $pr \approx \hbar$, ou pour simplifier

$$pr = \hbar. \tag{4.2}$$

A l'aide de (4.2) excluons de (4.1) la grandeur r; nous obtenons

$$E(p) = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2 p}{\hbar}. \tag{4.3}$$

Il est aisé de se rendre compte que la fonction $E(p)$ présente un minimum pour une certaine valeur $p = p_1$. Désignons ce minimum par E_1. On peut la considérer comme une estimation de l'énergie de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène et la quantité $r_1 = \hbar/p_1$ comme une estimation des dimensions linéaires de l'atome (dans la théorie de Bohr c'est le rayon de la première orbite). En égalant à zéro la dérivée $\frac{d}{dp} E(p)$, on trouve $p_1 = me^2/\hbar$. On en tire directement les estimations qui nous intéressent (comparez à (2.6) et (2.7)):

$$r_1 = \frac{\hbar^2}{me^2}, \quad E_1 = -\frac{me^4}{2\hbar^2}. \tag{4.4}$$

Les estimations (4.4) coïncident parfaitement avec les résultats des calculs selon la théorie rigoureuse*. Il est évident que cet accord

* Dans la théorie rigoureuse la quantité r_1 représente la distance jusqu'au noyau de l'atome d'hydrogène. C'est à cette distance que la probabilité de trouver l'électron est la plus grande; r_1 est la distance caractéristique de l'état fondamental [cf. (5.4)].

parfait des deux procédés de calcul est dans une certaine mesure dû au hasard. Mais ce qui est indubitable c'est l'ordre de grandeur du résultat obtenu. Nous voyons que pour obtenir l'ordre de grandeur du résultat recherché il suffit de substituer dans la formule classique (4.1) aux valeurs exactes des variables dynamiques des quantités qui caractérisent la dispersion des valeurs de ces variables, donc de les remplacer par les incertitudes sur leurs valeurs; après cela il ne reste qu'à mettre en œuvre les relations quantiques reliant ces incertitudes.

Estimation de l'énergie des oscillations de point zéro d'un oscillateur. Procédons comme nous venons de le faire dans l'exemple précédent. L'énergie d'un oscillateur harmonique monodimensionnel classique est donnée par l'expression

$$E = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}. \tag{4.5}$$

En considérant p_x et x comme les incertitudes sur les valeurs de l'impulsion p_x et de la coordonnée x d'une microparticule effectuant des oscillations et utilisant en qualité de relation d'incertitude l'égalité $p_x x = \hbar$, on tire de (4.5)

$$E(p_x) = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hbar^2}{2p_x^2}. \tag{4.6}$$

En égalant à zéro la dérivée $d/dp_x E(p_x)$, on trouve la valeur $p_0 = \pm\sqrt{m\hbar\omega}$, pour laquelle la fonction $E(p_x)$ passe par un minimum. On constate aussitôt que la valeur minimum de $E(p_x)$ est égale à

$$E_0 = E(p_0) = \hbar\omega. \tag{4.7}$$

Ce résultat est fort intéressant en ce qu'il montre qu'en mécanique quantique l'énergie d'un oscillateur ne peut devenir nulle; sa plus petite valeur est de l'ordre de $\hbar\omega$. On l'appelle l'*énergie des oscillations de point zéro*. Notons que l'estimation (4.7) ne se distingue de la valeur exacte de cette énergie que par le facteur 1/2 (résultat exact: $E_0 = \hbar\omega/2$).

En tenant compte des oscillations de point zéro, on arrive notamment à une conclusion intéressante: l'énergie des oscillations atomiques des atomes d'un cristal ne peut devenir nulle même à la température du zéro absolu.

L'existence d'oscillations de point zéro illustre une idée de principe tout à fait générale: on ne peut imposer à une microparticule de rester au fond d'un puits de potentiel, autrement dit, on ne peut le faire « tomber » au fond du puits. Cette conclusion est indépendante de la forme du puits de potentiel puisqu'elle résulte directement de la relation d'incertitude; si la microparticule tombait au fond du puits, cela impliquerait que son impulsion est devenue nulle, de même que l'incertitude correspondante; mais dans ce cas l'incer-

titude sur la coordonnée de position deviendrait indéfiniment grande, ce qui contredit la possibilité même de présence de la microparticule au fond du puits de potentiel.

Estimation du flou du bord de la bande d'absorption optique dans l'effet Franz-Keldych. L'effet, qui a été indépendamment découvert en 1958 par Franz et par Keldych, consiste en ce que dans un champ électrique homogène le minimum de l'énergie des électrons de la bande de conduction d'un semiconducteur se trouve déplacé vers le bas de l'échelle des énergies; le résultat en est que le bord de la bande d'absorption optique fondamentale devient flou (ce qui entraîne la possibilité d'absorption de photons dont l'énergie est inférieure à la largeur de la bande interdite) [22]. Le déplacement en énergie des états électroniques qui caractérise ce flou peut être estimé par le même procédé que ci-dessus. Utilisons l'expression classique de l'énergie d'une particule chargée soumise à l'action d'un champ électrique d'intensité $\mathscr{E}$:

$$E = \frac{p_x^2}{2m} - \mathscr{E}ex, \tag{4.8}$$

m représente ici la masse effective de l'électron dans la bande de conduction. En assimilant p_x et x aux incertitudes sur les valeurs de l'impulsion et de la coordonnée de position de l'électron et en utilisant en qualité de relation d'incertitude l'égalité $p_x x = \hbar$, nous tirons de (4.8):

$$E(p_x) = \frac{p_x^2}{2m} - \frac{\mathscr{E}e\hbar}{p_x}. \tag{4.9}$$

Nous égalons à zéro la dérivée $d/dp_x E(p_x)$ et nous trouvons la valeur $p_0 = -\sqrt[3]{\mathscr{E}e\hbar m}$ pour laquelle s'observe le minimum de la fonction $E(p_x)$:

$$E_0 = \frac{3}{2}\sqrt[3]{(\mathscr{E}e\hbar)^2/m} \approx \sqrt[3]{(\mathscr{E}e\hbar)^2/m}. \tag{4.10}$$

C'est précisément la formule qui donne une estimation du décalage du bord de la bande fondamentale que l'on observe dans l'effet Franz-Keldych.

Pourquoi l'électron ne tombe-t-il pas sur le noyau? La théorie de Bohr qui postule l'existence d'états stationnaires n'explique cependant pas pourquoi l'électron en mouvement accéléré ne rayonne pas d'énergie, ni pourquoi il ne tombe finalement pas sur le noyau. L explication résulte de la relation (3.3). La chute de l'électron sur le noyau signifierait que l'incertitude sur sa coordonnée de position est devenue plus petite; si avant de tomber sur le noyau l'électron était localisé au sein de l'atome, donc dans une région de l'espace dont la dimension linéaire est de l'ordre de $\hbar^2/me^2 \approx 10^{-8}$ cm [cf. (4.4)], une fois qu'il serait tombé sur le noyau l'électron devrait être localisé dans une région de dimension linéaire inférieure à 10^{-12} cm.

D'après (3.3) une localisation spatiale plus précise de l'électron s'accompagne d'une plus grande incertitude sur la valeur de son impulsion ; par suite, si l'électron venait à tomber sur le noyau, son impulsion devrait s'accroître, ce qui exigerait une dépense d'énergie. Or cela signifie qu'il faut dépenser de l'énergie non pour empêcher l'électron de tomber sur le noyau, mais bien au contraire pour l'obliger à se « localiser » sur le noyau.

La mise en évidence de l'existence d'oscillations de point zéro montre que toute microparticule se trouvant dans un puits de potentiel possède une énergie minimum E_0 qui n'est jamais nulle. La valeur E_0 dépend notamment des dimensions spatiales du puits de potentiel (de sa largeur a qui caractérise le degré de localisation spatiale de la microparticule). En tenant compte de la relation d'incertitude, on conçoit fort bien que l'on doit avoir :

$$E_0 \approx \frac{\hbar^2}{ma^2}. \tag{4.11}$$

Lorsque a diminue, E_0 augmente. Lorsque a devient suffisamment petit, l'énergie E_0 peut devenir plus grande que la profondeur du puits de potentiel. Il est évident que dans un tel puits de potentiel la microparticule ne peut venir se placer.

La chute de l'électron sur le noyau correspondrait à une diminution de la largeur du puits de potentiel de 10^{-8} cm jusqu'à 10^{-12} cm (et même au-delà). Selon (4.11) l'énergie minimum E_0 doit alors s'accroître et passer de 10 à 10^9 eV (et au-delà). Il s'ensuit que l'énergie minimum de l'électron deviendrait alors de plusieurs ordres de grandeur plus grande que l'énergie de liaison d'un nucléon dans le noyau atomique, qui est d'environ 10^7 eV. Il en découle qu'il est impossible d'obliger l'électron de venir se placer dans le puits de potentiel du noyau, donc de se localiser dans les limites du noyau atomique.

Ainsi se trouve levé non seulement le problème de la chute de l'électron sur le noyau, mais se trouve résolue une question de principe : *l'électron ne peut être un constituant du noyau atomique.*

La question des « trajectoires » des microparticules. Pour définir la trajectoire d'une particule, on doit en toute rigueur connaître à tout instant sa coordonnée de position et son impulsion [pour représenter la dépendance $x(t)$, on doit connaître à tout instant t les valeurs de x et de dx/dt]. Or d'après la relation d'incertitude (3.3) une microparticule ne peut avoir simultanément une valeur déterminée de sa coordonnée et une valeur déterminée de la projection correspondante de son impulsion ; il s'ensuit qu'en toute rigueur la notion de trajectoire n'a pas de sens pour les microparticules.

L'absence de trajectoire est liée à l'existence de propriétés ondulatoires, ce qui fait qu'on ne peut assimiler les microparticules aux corpuscules classiques. Au déplacement d'une microparticule le

long de l'axe des x on ne peut faire correspondre une fonction $x(t)$ différentiable, contrairement au cas des particules classiques où la fonction $x(t)$ l'est; si on connaît à un instant t la valeur de x, on ne peut donc prédéterminer la coordonnée de position de la microparticule à un instant ultérieur $t + dt$.

L'application de ces considérations à la théorie de Bohr implique que l'on doit renoncer au concept même d'« orbites électroniques dans les atomes ». On ne peut parler que d'une localisation de l'électron dans les limites de l'atome tout entier; le concept d'orbite exige que la localisation spatiale de l'électron soit plus précise. Les conséquences que pourrait avoir une localisation plus précise de l'électron se laissent apprécier en reprenant le problème de la « chute de l'électron sur le noyau ». De ce fait, le modèle planétaire de l'atome ne doit donc être considéré que comme une étape intermédiaire dans le développement de nos conceptions relatives à l'atome. Longtemps après, dans les années cinquante, Bohr lui-même se rappelait en riant la question d'un étudiant qui lui demanda: « *Est-ce possible qu'il existait des idiots qui s'imaginaient que l'électron se déplace sur des orbites?* »

On notera qu'avec le rejet du concept d'orbites électroniques dans les atomes se trouve automatiquement levée la contradiction relative aux sauts « instantanés » des électrons d'une orbite sur une autre, dont il a été question au § 2.

Il existe cependant des situations où il est admissible d'utiliser le concept de « trajectoire d'une microparticule ». A titre d'exemple, considérons le mouvement des électrons dans un tube de télévision. L'impulsion de l'électron le long de l'axe du tube est $p = \sqrt{2meU}$, U étant la tension d'accélération appliquée. La mise en faisceau des électrons correspond à une certaine localisation de leurs coordonnées dans une direction perpendiculaire à l'axe; le degré de localisation est défini par le diamètre d du faisceau. Selon (3.3) il doit exister une incertitude sur la valeur de l'impulsion le long de la direction perpendiculaire à l'axe du faisceau: $\Delta p \approx \hbar/d$. Du fait de cette indétermination de l'impulsion l'électron peut dévier de l'axe d'un angle $\Delta\theta \approx \Delta p/p \approx \hbar/pd$. Soit L la longueur du trajet de l'électron dans le kinescope. L'incertitude sur le point d'impact de l'électron sur l'écran sera donnée par: $\Delta x \approx L\Delta\theta \approx L\hbar/pd$. En posant $U = 20$ kV, $d = 10^{-3}$ cm, $L = 10^2$ cm, on trouve $\Delta x \approx$ $\approx 10^{-5}$ cm. La dispersion des points d'impact des électrons sur la cible, déterminée par la relation d'incertitudes, ne dépasse pas dans ce cas le diamètre du pinceau électronique. Il est évident que dans ce cas on peut étudier le mouvement des électrons par les procédés classiques.

L'effet tunnel — passage des électrons au travers des barrières de potentiel. Considérons une barrière de potentiel dont la hauteur U est plus grande que l'énergie de la microparticule (fig. 4.1). Cher-

chons à répondre à la question suivante : est-il possible qu'une particule se trouvant quelque part à gauche de la barrière se retrouve au bout d'un certain temps à droite de celle-ci à condition toutefois qu'elle ne reçoive aucune énergie supplémentaire de l'extérieur ? La mécanique classique donne une réponse négative à cette question—un corpuscule classique ne peut en aucun cas passer sous la barrière, car s'il en était ainsi l'énergie totale de la particule en un point A serait plus petite que son énergie potentielle, ce qui est physiquement absurde.

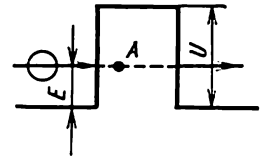


Fig. 4.1.

Cette interdiction reste-t-elle valable pour une microparticule ? On peut démontrer qu'il n'en est plus de même en vertu de la relation (3.2). Supposons que la microparticule arrive de l'infini jusqu'à la paroi de gauche de la barrière de potentiel. Avant d'atteindre la barrière, la microparticule se trouvait dans un état de mouvement libre pendant un temps indéfiniment long et possédait donc une énergie bien déterminée. Voilà que maintenant la microparticule entre en interaction avec la barrière, ou plutôt avec ce qui a donné naissance à cette barrière. Supposons que la durée de cette interaction soit Δt. D'après (3.2) l'énergie d'une microparticule en interaction avec la barrière ne peut avoir une valeur déterminée et l'incertitude sur sa valeur sera égale à $\Delta E \gtrsim \hbar/\Delta t$. Si cette incertitude est du même ordre de grandeur que la hauteur U de la barrière, celle-ci cesse d'être un obstacle insurmontable pour la microparticule. La microparticule pourra donc « passer » au travers de la barrière de potentiel. Cet effet spécifiquement quantique a reçu le nom d'*effet tunnel*. Il permet notamment d'expliquer le phénomène de la désintégration α des noyaux atomiques. Remarquons que lorsqu'on considère l'effet tunnel on ne peut plus représenter le mouvement de la microparticule le long de la ligne représentée fig. 4.1 en pointillé, puisque celle-ci correspond à une trajectoire classique et que les microparticules n'ont pas de trajectoires. Il est donc vain d'essayer de déceler la microparticule quelque part sous la barrière de potentiel à un instant quelconque.

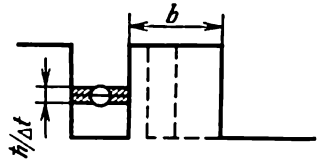


Fig. 4.2.

Nous avons déjà fait remarquer que l'énergie d'un électron en mouvement libre n'est pas quantifiée. On le démontre aisément en considérant l'effet tunnel. Supposons que la microparticule se trouve dans le puits de potentiel représenté fig. 4.2. La microparticule peut s'échapper de ce puits de potentiel par effet tunnel ; il s'ensuit que son temps de séjour dans le puits n'est pas infini. Si nous désignons son temps de séjour par Δt, il résulte de (3.2) que l'incertitude sur la valeur de l'énergie de la microparticule doit être de l'ordre de $\hbar/\Delta t$. Diminuons la largeur de la barrière de potentiel (lignes en pointillé sur la fig. 4.2).

Il est clair qu'à chaque diminution de la largeur de la barrière le temps de séjour Δt doit diminuer, puisque alors la probabilité de ce que la particule s'échappe du puits augmente. Mais Δt diminuant, l'incertitude sur la valeur de l'énergie de la microparticule $\hbar/\Delta t$ doit augmenter ; on peut assimiler cette augmentation à un étalement des niveaux d'énergie de la microparticule se trouvant dans le puits de potentiel. A la limite, lorsque la largeur de la barrière devient nulle, Δt s'annule et la microparticule devient une particule en mouvement libre, tandis que ses niveaux d'énergie s'étalent à un tel point qu'ils constituent un spectre d'énergie pratiquement continu.

§ 5. De l'impossibilité d'une interprétation classique du comportement des microparticules

La microparticule n'est pas un corpuscule classique.

On aboutit aux microparticules en poussant assez loin la « subdivision » des corps qui nous entourent en particules de plus en plus petites. Il est donc naturel que la microparticule soit considérée comme un *corpuscule*. Ce point de vue est corroboré par ce que les microparticules possèdent une masse de repos et portent des charges électriques bien déterminées. Il serait dénué de sens de parler d'un demi-électron ayant une masse et une charge deux fois plus petites que celles de l'électron. Les termes « microparticule », « particule élémentaire » invoquent aussitôt le concept de particule ou celui de corpuscule.

Il ressort de ce que nous venons de voir que la microparticule se distingue très notablement d'un corpuscule classique. Tout d'abord la microparticule n'a pas de trajectoire, ce qui est pour tout corpuscule classique un attribut nécessaire. L'utilisation pour l'étude des microparticules des caractéristiques corpusculaires telles que l'énergie, la coordonnée de position, l'impulsion, le moment cinétique, n'est possible que dans les limites fixées par les relations d'incertitude. Les transmutations des microparticules, les désintégrations spontanées, l'existence d'un moment propre (spin) indestructible, leur aptitude à traverser les barrières de potentiel, tout cela témoigne de ce que les microparticules ne ressemblent nullement aux corpuscules classiques.

Aux conceptions corpusculaires font face les conceptions ondulatoires, et il n'est donc pas étonnant que la différence flagrante entre les corpuscules classiques et les microparticules s'interprète par ce que ces dernières manifestent des propriétés ondulatoires qui déterminent l'existence des relations d'incertitude et tout ce qui en découle. De ce point de vue la remarque suivante de De Broglie est bien caractéristique [23] : « *Pendant plus d'un siècle on avait trop négligé dans l'étude de l'optique l'aspect corpusculaire, donnant la prépondérance à l'aspect ondulatoire. Dans la théorie de la matière on avait trop tendance à commettre la même erreur, mais dans le sens opposé. Nous nous attachons trop au concept de « particule » et négligeons trop celui d'« onde ».* »

Cette remarque de De Broglie est parfaitement justifiée. Et cependant on doit bien se garder d'exagérer l'aspect ondulatoire dans l'étude des microparticules. On doit bien se rappeler que la microparticule n'étant pas une particule classique, n'est pas non plus une onde classique.

La microparticule n'est pas une onde classique. On peut tirer des enseignements précieux de l'analyse d'une erreur qui a encore cours aujourd'hui chaque fois que l'on cherche à trop simplifier l'étude de la mécanique quantique. Examinons cette erreur à l'aide de deux exemples.

Premier exemple. On affirme que des propriétés ondulatoires de l'électron on peut déduire la condition de quantification du moment, postulée dans la théorie de Bohr. Pour ce faire, on procède comme suit. Soit $2\pi r_n$ la longueur de la n-ième orbite de Bohr. Le long de cette orbite se déplace un électron, dont la longueur d'onde de De Broglie est $\lambda_n = 2\pi\hbar/p_n$. La principale hypothèse que l'on fait est que la longueur de l'orbite doit correspondre à n longueurs d'onde λ_n de l'électron, c'est-à-dire $2\pi r_n = n\lambda_n$. On en tire directement la condition de quantification cherchée

$$p_n r_n = n\hbar. \tag{5.1}$$

Deuxième exemple. On affirme que grâce aux propriétés d'onde de l'électron il est facile d'établir une formule donnant les niveaux d'énergie dans un puits de potentiel; il suffit pour cela d'admettre qu'aux différents états stationnaires correspond un nombre déterminé de demi-longueurs d'onde de De Broglie pouvant être disposées suivant la largeur du puits de potentiel (par analogie avec le nombre de demi-longueurs d'onde que l'on dispose sur la longueur d'une corde fixée aux deux extrémités). En désignant par a la largeur d'un puits de potentiel unidimensionnel de forme rectangulaire, on écrit $a = n\lambda_n/2$ et on en tire aussitôt le résultat escompté:

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}. \tag{5.2}$$

Les deux résultats obtenus [(5.1) et (5.2)] sont corrects, puisque la théorie rigoureuse aboutit à ces mêmes formules. Cependant le procédé d'établissement des résultats que nous venons d'exposer n'est pas valable. Dans les deux cas on commet la même erreur de principe: à la base du raisonnement on trouve l'hypothèse erronée selon laquelle l'électron se trouvant dans un puits de potentiel peut avoir une longueur d'onde de De Broglie bien déterminée, ce qui sous-entend que son impulsion a une valeur bien déterminée. Or d'après (3.3) l'impulsion d'une microparticule liée présente une incertitude égale à $\Delta p \gtrsim \hbar/a$. Comme dans les exemples cités on avait posé $p \approx \hbar/\lambda \approx \hbar/a$, on doit en conclure que la valeur de l'impulsion est du même ordre de grandeur que l'incertitude sur cette

valeur donnée par (3.3). Il est clair que dans ces conditions-là on ne peut dire que l'impulsion de l'électron présente une certaine valeur quelle qu'elle soit et ne serait-ce qu'approximativement (la même chose vaut pour la longueur d'onde de De Broglie) *.

Les exemples que nous venons de donner pèchent par une exagération de l'aspect ondulatoire du problème. Il est inadmissible d'identifier l'électron se trouvant dans un puits de potentiel à une onde classique placée dans une espèce de résonateur. L'image d'une onde électronique dans un résonateur est une simplification aussi primitive que l'image d'un électron se présentant comme une petite bille se mouvant sur une orbite classique. Dans ce qui suit nous reviendrons encore sur la question des ondes en mécanique quantique, mais il est tout indiqué de souligner ici que le terme « onde de De Broglie » n'implique nullement une onde classique. Ce terme ne fait que refléter dans notre esprit le fait que les microparticules manifestent des propriétés d'onde.

Sur les tentatives de présenter les microparticules comme une symbiose d'un corpuscule et d'une onde. Puisqu'une microparticule n'est ni un corpuscule ni une onde, peut-être est-elle une symbiose d'un corpuscule et d'une onde? On a essayé de bâtir différents modèles d'une telle symbiose et d'arriver ainsi à modeler la dualité onde-corpuscule. Une de ces tentatives se fondait sur la représentation d'une microparticule comme une formation d'ondes délimitée dans le temps et l'espace. Cette formation pourrait être le *paquet d'onde* que nous avons cité au § 3. Ce pourrait être tout aussi bien un « bout » d'onde que l'on appelle généralement un *train d'onde*. On a d'autre part essayé d'utiliser le modèle de l'*onde-pilote*, où la microparticule est considérée comme constituée par un « noyau » corpusculaire et par une certaine onde qui contrôle le mouvement du « noyau ».

Une des variantes du modèle de l'onde-pilote est décrite dans le livre de D. Bohm [25] : « *Postulons d'abord qu'à toute particule (un électron par exemple) est associée un « corps » occupant une petite région de l'espace; pour la majorité des applications au niveau atomique on peut assimiler ce « corps » à un point matériel. Nous supposerons par ailleurs qu'à ce corps est associée une onde sans laquelle le corps ne saurait être décelé. Cette onde représenterait les oscillations d'un nouveau champ* (champ ψ), *qui, à certains points de vue, ressemblerait aux champs de gravitation et électromagnétique, mais qui présenterait des traits caractéristiques qui lui sont propres. On suppose ensuite que le champ ψ est en interaction avec le « corps ». Cette interaction devrait avoir pour résultat que le corps aurait tendance à se trouver là où l'intensité du champ ψ est maximum. Cette tendance est contrecarrée par les mouvements désordonnés du « corps », pouvant être une conséquence des fluctuations du champ ψ. Ce sont ces fluctuations qui déterminent les mouvements désordonnés des corps dans toute la région de l'espace qui lui est accessible; cependant la tendance à ce comportement aléatoire du corps est contrecarrée par l'action d'une « force quantique » qui chasse le « corps » dans les régions de la plus grande intensité du champ ψ. En définitive on arrive à une répartition du « corps » qui prédomine dans les régions de grande intensité du champ ψ.* »

* Cette question est traitée exhaustivement au § 23; voir aussi [24].

La fig. (5.1) illustre ce modèle appliqué au passage d'une microparticule à travers des fentes pratiquées dans un écran: l'onde ψ est diffractée par les deux fentes, tandis que le « corps » passe à travers l'une des fentes et se laisse enregistrer par l'écran détecteur, conformément au résultat de l'interférence des ondes ψ.

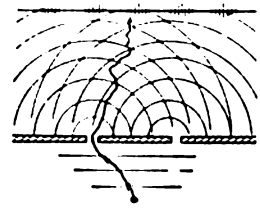


Fig. 5.1.

Il n'est pas exclu qu'à première vue un tel modèle puisse paraître séduisant, ne serait-ce que parce qu'il concrétise le problème. Mais disons-le tout net, ces modèles sont erronés. Pour l'instant nous ne préciserons pas par où pèche le modèle de l'onde-pilote, mais nous remarquerons qu'il est fort complexe puisqu'il fait appel à des notions aussi artificielles que celle du « champ ψ » qui « à certains points de vue ressemblerait aux champs de gravitation et électromagnétique » ou celle de « force quantique » qui reflète l'interaction d'un certain « corps » avec le champ ψ. Par la suite le lecteur pourra se rendre compte que l'inadéquation de tels modèles tient non pas à des raisons de détails, mais à des raisons de principes. Le lecteur comprendra alors qu'il est tout à fait vain d'essayer d'*interpréter à la lettre* l'idée de la dualité corpuscule-onde, ou de modeler de quelque façon que ce soit la symbiose d'un corpuscule et d'une onde. La microparticule n'est pas une symbiose d'un corpuscule et d'une onde.

Que faut-il entendre par dualisme onde-corpuscule? Actuellement on entend par dualisme onde-corpuscule les *potentialités* d'une microparticule de manifester ses différentes propriétés en fonction des conditions extérieures dans lesquelles elle se trouve, notamment des conditions de son observation. A ce propos Fock écrivait [1]: « *Dans certaines conditions les microparticules atomiques manifestent surtout des propriétés d'onde et dans certaines autres des propriétés de corpuscule; il existe également des conditions où les propriétés d'onde et de corpuscule se manifestent simultanément. On peut dire qu'une microparticule présente des potentialités de se comporter en fonction des conditions extérieures soit comme une onde, soit comme un corpuscule, soit de façon intermédiaire. Le dualisme onde-corpuscule consiste précisément en ce que la microparticule peut manifester l'un ou l'autre type de propriétés qui lui sont propres. Toute autre interprétation, notamment celle qui consiste à prendre à la lettre l'expression dualisme et d'en bâtir un modèle, est erronée.* »

Considérons un exemple particulièrement simple. Soit un faisceau d'électrons qui traversent les fentes d'un écran et tombent sur un écran-détecteur. Lors de leur passage par les fentes, les électrons manifestent leurs propriétés d'onde et cela détermine le caractère interférentiel de la répartition électronique au-delà des fentes. Par contre, lors de leurs impacts sur l'écran détecteur les électrons mani-

festent leurs propriétés corpusculaires, et chacun d'eux laisse la trace en différents points de l'écran. On peut dire que les électrons passent au travers des fentes comme des « ondes » et se laissent enregistrer par l'écran détecteur comme des « particules ».

C'est ainsi que l'on dit parfois que dans certaines conditions la microparticule est « une onde » et dans d'autres « une particule ». Une telle interprétation du dualisme onde-corpuscule est incorrecte. Quelles que soient les conditions, une microparticule n'est ni une onde, ni un corpuscule, ni même une symbiose des deux. C'est un objet extrêmement *spécifique* qui est capable de manifester, selon les circonstances, des propriétés d'onde ou de corpuscule plus ou moins prononcées. La seule interprétation correcte consiste à dire que le dualisme onde-corpuscule reflète les potentialités de la microparticule de manifester des propriétés différentes dans des circonstances différentes. Il en découle une conclusion importante: *il est par principe impossible d'élaborer un modèle concret d'une microparticule.*

L'électron dans l'atome. L'impossibilité de réaliser un modèle concret d'une microparticule n'exclut pas la possibilité d'utiliser des représentations conventionnelles pour se faire une idée de la microparticule placée dans des conditions données. Considérons à titre d'exemple un électron appartenant à un atome.

Rappelons que les états de l'électron dans un atome sont décrits par l'ensemble des nombres quantiques n, l, m, σ. Un état donné est caractérisé par une énergie déterminée, qui dans le cas particulier de l'atome d'hydrogène ne dépend que du nombre n [cf. (2.7)] et dans le cas général des nombres n et l. Dans l'atome, l'électron est spatialement délocalisé en ce sens que l'incertitude sur sa coordonnée de position est de l'ordre de grandeur des dimensions de l'atome. Généralement on use de l'idée du *nuage électronique* qui sert à donner une représentation conventionnelle de l'électron au sein de l'atome. La forme et les dimensions effectives du nuage électronique dépendent des nombres quantiques n; l, m et varient donc avec l'état de l'électron.

Pour définir la forme et les dimensions du nuage électronique, on introduit une certaine fonction

$$u_{nlm}(r, \theta, \varphi) = v_{nl}(r)\, Z_{lm}(\theta, \varphi), \tag{5.3}$$

où r, θ et φ sont les coordonnées sphériques de l'électron. On attribue à la fonction u_{nlm} la signification suivante: $u_{nlm}(r, \theta, \varphi)\, dV$ est la *probabilité* de présence dans un élément de volume dV à proximité du point (r, θ, φ) de l'électron se trouvant dans un état défini par les nombres quantiques n, l, m. La fonction $u_{nlm}(r, \theta, \varphi)$ joue donc le rôle d'une *densité de probabilité* de présence de l'électron dans une région donnée de l'espace. Rappelons que $dV = r^2 dr d\Omega$,

$d\Omega = \sin\theta\, d\theta\, d\varphi$ est l'élément d'angle solide. La fonction

$$w_{nl}(r)\,dr = v_{nl}(r)\,r^2\,dr \tag{5.3a}$$

représente par suite la probabilité de trouver un électron de nombres quantiques n, l à une distance du noyau comprise entre r et $r + dr$.

La fig. 5.2, *a* représente l'allure des fonctions $w_{nl}(r)$ pour différents états de l'électron dans l'atome d'hydrogène. On notera que les fonctions w_{10}, w_{21}, w_{32} présentent des maximums dont les positions correspondent aux première, deuxième et troisième orbites

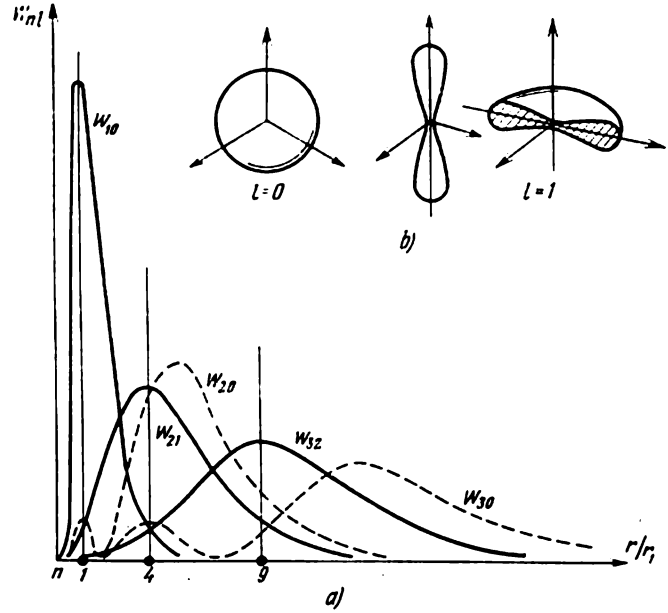


Fig. 5.2.

de la théorie de Bohr. La fig. 5.2, *b* illustre l'allure de la fonction Z_{lm} pour plusieurs états de l'électron. Lorsque $l = 0$ (électron dit à l'état *s*), on a un nuage électronique en forme de sphère. Lorsque $l = 1$ (électron *p*), la fonction se laisse représenter soit par une sorte de quenouille, soit par un toroïde, selon la valeur du nombre m. Par conséquent, pour se faire une idée de l'électron dans l'atome, on peut utiliser en qualité d'*images conventionnelles* les modèles d'une sphère, d'une quenouille, d'un tore, etc.

L'état fondamental de l'atome d'hydrogène se caractérise par un nuage électronique sphérique. La théorie montre que dans ce cas [11]:

$$w_{nl}(r) = 4\frac{r^2}{r_1^3}\exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right). \tag{5.4}$$

Le paramètre r qui détermine le rayon efficace du nuage électronique est donné par la relation (4.4); dans la théorie de Bohr ce paramètre figurait en qualité de première orbite électronique.

Remarquons pour conclure que les transitions électroniques s'accompagnent non seulement d'une variation d'énergie, mais aussi d'une réédification des nuages électroniques dont la forme et les dimensions changent.

§ 6. Le rejet des conceptions de la physique classique

Remarques préliminaires. Nous commençons à nous rendre compte que le passage de l'étude des macrophénomènes à celle des microphénomènes implique le rejet des conceptions de la physique classique. La continuité du spectre des valeurs des grandeurs physiques devient inutilisable, on doit renoncer au concept de trajectoire, le principe du déterminisme classique cesse d'être indubitable. A la base des considérations que l'on utilise en mécanique quantique on trouve les concepts de quantification (du caractère discret) et du dualisme onde-corpuscule qui tous deux sont étrangers à la physique classique.

Nous avons donné différents exemples qui laissaient entendre qu'on devait renoncer au principe classique d'une subdivision indéfinie des corps dans l'espace et des phénomènes dans le temps. Ainsi, par exemple, les questions relatives à la structure interne des particules élémentaires se trouvent dénuées de sens. Il est également vain d'essayer de suivre l'évolution dans le temps du processus des transitions quantiques.

Les concepts d'énergie, d'impulsion, de moment, qui sont largement utilisés en physique classique, le sont aussi en mécanique quantique. Mais en mécanique quantique ces concepts sont utilisés tout autrement, sur la base d'une révision des corrélations connues, tenant compte de la possibilité d'une quantification des grandeurs et des limitations qu'imposent les relations d'incertitude. En mécanique quantique surgit un nouveau problème, inconnu de la physique classique, celui de la mesure simultanée de plusieurs grandeurs physiques qui impose de reconsidérer la question de l'état et des moyens de le définir.

On ne peut manquer de souligner encore une fois que l'interprétation classique d'une microparticule est dénuée de sens, et qu'il est impossible d'utiliser des modèles concrets, usuels en physique classique.

Identité des microparticules. Le rejet de l'idée classique de l'individualisation des objets d'étude est une question de principe. En mécanique classique tout objet d'étude présente son individualité propre, ce qui, en cas de besoin, permet de numéroter tous les objets à l'étude et d'en étudier les comportements individuels. De ce point

de vue deux objets classiques, aussi semblables soient-ils, sont toujours différents et ne sont donc jamais absolument identiques. En mécanique quantique deux microparticules de même espèce doivent être considérées comme *rigoureusement identiques*. Ainsi tous les électrons sont identiques, sont identiques tous les atomes d'hydrogène non excités, de même que le sont tous les noyaux d'hélium, etc.

Supposons que nous ayons affaire à plusieurs électrons et qu'à l'instant $t = 0$ on a attribué à l'un d'eux le numéro 1. Pourra-t-on reconnaître cet électron à un instant t ultérieur? Il serait facile de le faire s'il était possible de le « marquer » d'une façon ou d'une autre. On pourrait se passer du marquage s'il était possible de ne pas le perdre de vue, c'est-à-dire de l'observer sans discontinuer sur une trajectoire établie mentalement. C'est ainsi que l'on aurait procédé s'il s'était agi de corps classiques semblables. Cependant ces procédés ne valent rien pour l'électron puisqu'il est en principe impossible de le marquer et qu'il n'a pas de trajectoire dans le sens usuel du mot. L'électron que nous avons « numéroté » à l'instant $t = 0$ en fait ne l'a pas été, puisqu'il ne présente aucune individualité qui permettrait de le discerner à un instant t dans un groupe d'électrons. Deux électrons se ressemblent beaucoup plus que ne se ressemblent les deux gouttes d'eau du proverbe. Les gouttes d'eau sont des objets classiques et peuvent être de taille différente et de composition chimique différente.

Il est évident que l'identité des microparticules n'exclut nullement la possibilité de les distinguer d'après leurs états, si elles se trouvent dans des états différents. Deux électrons appartenant à deux atomes différents, tout en étant identiques, peuvent *être distingués* l'un de l'autre. L'appartenance de l'électron à une espèce donnée d'atomes permet de le « distinguer » parmi d'autres. Cependant rien ne sera physiquement changé si on permute deux électrons. Dans tous les cas où une telle permutation est réalisable, par exemple, lorsque les atomes s'unissent pour former une molécule, cette « distinction » des électrons atomiques disparaît.

Le nécessaire et le contingent dans le comportement d'une microparticule. Le déterminisme laplacien exclut tout effet du hasard dans le comportement d'un corps donné, la mécanique classique est dominée par le *nécessaire*. C'est pourquoi les lois de la mécanique classique sont *dynamiques* et non statistiques. Le *hasard* (et donc les *lois statistiques*) n'apparaît en physique classique que lorsqu'elle étudie des ensembles d'objets et de corpuscules.

De ce point de vue il est essentiel de noter qu'en mécanique quantique nous nous trouvons en présence d'une situation qualitativement nouvelle: nous pouvons discerner dans le comportement d'une seule microparticule des éléments nécessaires et contingents. Un atome excité revient à l'état fondamental sans être soumis à une quelconque action extérieure, donc *spontanément*; ce processus s'accompagne de transitions électroniques entre les niveaux d'énergie. On ne peut par principe prédéterminer le moment où un atome excité donné retournera à son état fondamental, puisque cet acte est aléatoire. Il est tout aussi impossible de prédire quand se produira

la désintégration d'une certaine particule élémentaire, d'un neutron par exemple. Ce processus est lui aussi aléatoire.

On discerne dans le comportement d'une microparticule non seulement des éléments aléatoires, mais également des éléments certains. Nous avons déjà indiqué au § 1 que si à l'instant $t = 0$ nous avons N_0 neutrons, avec $N_0 \gg 1$, on peut affirmer avec certitude qu'à l'instant t il n'en subsistera que $N_0 \exp(-t/\tau)$, τ étant une constante dite durée de vie du neutron. Dans ce cas nous nous trouvons en présence d'un événement certain et nécessaire. Vis-à-vis d'un neutron donné cette certitude se manifeste dans l'existence d'une probabilité déterminée de survivre à l'instant t puisqu'il a survécu à l'instant $t = 0$; cette probabilité est égale à $\exp(-t/\tau)$. Il est remarquable que cette probabilité est indépendante du temps de vie du neutron considéré qui s'est écoulé jusqu'à $t = 0$. La nécessité se manifeste également dans l'existence des lois de conservation auxquelles sont soumis les processus de désintégration et d'une manière générale les processus de transmutation des microparticules. On peut citer encore le caractère déterminé des réactions de désintégration, par exemple tous les neutrons libres se décomposent en donnant un proton, un électron et un antineutrino électronique.

Le fait que l'on trouve dans le comportement des microparticules des éléments contingents et des éléments nécessaires a une conséquence extrêmement importante. La mécanique quantique est *par principe une théorie statistique* dont l'un des principaux attributs est la probabilité. Fock notait à ce propos [1] : « *en mécanique quantique la notion de probabilité est une notion de premier plan qui y joue un rôle fondamental* ». On peut dire que le comportement d'une microparticule prise individuellement est aléatoire, mais que ce comportement aléatoire est dicté par la nécessité *. Un exemple adéquat en est fourni par le nuage électronique que nous avons considéré au § 5. Le fait de déceler la présence d'un électron en un point donné situé à proximité du noyau est un fait aléatoire, tandis que la probabilité de constater sa présence en un point donné (r, θ, φ) est, elle, bien déterminée; cette probabilité est définie par une fonction telle que (5.3), ce qui revient à dire qu'elle est déterminée par la forme et les dimensions du nuage électronique convenablement choisi.

Remarquons encore que ce qu'il y a d'aléatoire dans le comportement d'une microparticule individuelle résulte en fait des relations d'incertitude. Utilisant la relation (3.3), nous avons montré au § 4 qu'il était impossible d'« envoyer une microparticule en un point donné ». Cela signifie que le fait d'enregistrer l'impact d'un électron en un point de l'écran détecteur est aléatoire et nous ne pouvons parler que de la probabilité de cet impact. Au § 3 nous

* On peut rappeler ici une pensée d'Engels qui s'applique fort bien à ces considérations : « *le nécessaire se fraye un chemin à travers le contingent* ».

avons introduit la notion de transitions virtuelles d'une microparticule en nous basant sur la relation (3.2). Il est facile de se rendre compte de ce que ces transitions virtuelles témoignent, elles aussi, du comportement aléatoire des microparticules. Pour bien montrer le caractère spécifique de la physique des microparticules, il est nécessaire d'apporter des précisions sur la notion de transitions virtuelles et sur celle de microparticules virtuelles qui en découle.

Les transitions virtuelles et les microparticules virtuelles. Rien n'est, semble-t-il, aussi étranger à la physique classique que la notion de *transitions* et de *microparticules virtuelles*. Une transition virtuelle d'un électron du niveau E_2 sur le niveau E_1 suivie de la transition inverse ($E_2 \to E_1 \to E_2$) peut être traitée comme un processus lors duquel l'électron émet puis absorbe un photon d'énergie ($E_2 - E_1$). On dit que l'on a affaire à un photon virtuel. A la différence des photons qui prennent part aux transitions réelles, les photons virtuels ne peuvent être décelés expérimentalement. La naissance d'un photon virtuel n'exige pas que soit absorbée une énergie d'une source extérieure, de même que sa disparition ne s'accompagne d'aucun dégagement d'énergie. La loi de conservation de l'énergie n'est pas mise en défaut puisque le photon virtuel ne vit que pendant un temps Δt très court, de sorte que l'incertitude sur l'énergie d'un électron ayant émis un photon virtuel est $\Delta E \gtrsim \hbar/\Delta t$; cette incertitude est du même ordre de grandeur que l'énergie de l'électron ($E_2 - E_1$) ou même plus grande que celle-ci. Physiquement le schéma caractérisant l'émission ou l'absorption par un électron de photons virtuels est équivalent au schéma où l'électron effectue des transitions virtuelles.

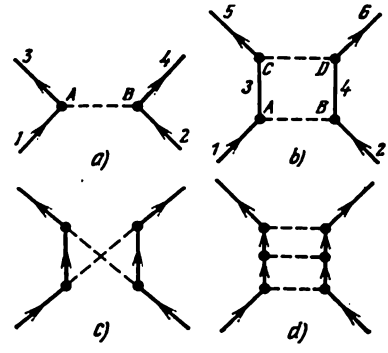


Fig. 6.1.

En adoptant l'idée de l'émission ou de l'absorption de photons virtuels, on peut imaginer que chaque électron est pour ainsi dire enveloppé d'un « nuage » de photons. On doit alors faire correspondre à ce « nuage » de photons le champ électromagnétique propre de l'électron. Deux électrons peuvent échanger des photons virtuels. Dans la théorie quantique des champs l'interaction mutuelle des électrons est précisément assimilée à un échange de photons virtuels. On utilise dans ce cas les diagrammes imaginés par Feynman, à l'aide desquels on arrive à envisager différents processus d'échange de photons virtuels.

La fig. 6.1 donne quelques exemples de *diagrammes de Feynman* illustrant le processus de diffusion mutuelle de deux électrons. Les

lignes en trait plein « représentent » les électrons et les lignes en pointillé les photons; les intersections des lignes en trait plein et des lignes en pointillé sont appelées *sommets* des diagrammes. Examinons le diagramme *a*. *1* et *2* désignent deux électrons avant leur diffusion mutuelle, *AB* désigne un photon virtuel échangé par les électrons lors de leur interaction (notons que toutes les particules représentées sur le diagramme sont virtuelles); *3* et *4* représentent les électrons après diffusion. Voyons le diagramme *b*, *1* et *2* représentent les électrons avant leur diffusion mutuelle, *AB* et *CD* représentent les photons virtuels échangés par les deux électrons, *3* et *4* représentent les électrons virtuels et *5* et *6* les électrons après diffusion. Le diagramme *c* est du même type que le diagramme *b*, mais les électrons font échange de deux photons. Le diagramme *d* décrit un des processus qui a lieu lorsque les électrons font échange de trois photons. On se rend compte que le nombre de diagrammes devenant de plus en plus compliqués à mesure que le nombre de photons échangés augmente, est pratiquement infini.

Pour pouvoir calculer la probabilité d'une diffusion mutuelle de deux électrons, on devrait en principe tenir compte de la contribution de chacun des processus décrits par les différents diagrammes. Heureusement les contributions de ces différents processus sont différentes, et elles sont d'autant plus petites que le nombre de sommets figurant sur les diagrammes est grand (plus le nombre de photons virtuels est grand). Les calculs théoriques montrent que quantitativement la contribution de chaque diagramme est caractérisée par la quantité sans dimensions $(e^2/\hbar c)^{n/2}$, où e est la charge de l'électron, c la vitesse de la lumière, $\hbar$ la constante de Planck et n le nombre de sommets figurant sur le diagramme. Comme $e^2/\hbar c = 1/137$, il s'ensuit que la principale contribution à la diffusion mutuelle des électrons est fournie par le diagramme *a* n'ayant que deux sommets (échange d'un seul photon virtuel). Dans l'approximation suivante on peut tenir compte des diagrammes *b* et *c* à quatre sommets (échange de deux photons); leur contribution sera de deux ordres de grandeur plus petite que celle du premier diagramme. Il n'est donc pas nécessaire de prendre en ligne de compte un grand nombre de diagrammes; il est amplement suffisant de prendre quelques diagrammes ayant un nombre relativement petit de sommets.

Il va de soi que l'étude des schémas de Feynman et des calculs qui y sont liés sort du cadre de notre ouvrage. Ces questions sont du ressort non pas de la mécanique quantique, mais de la *théorie quantique des champs* (*électrodynamique quantique*) *. Il nous est cependant utile de connaître les idées générales qui sont à la base des diagrammes de Feynman, puisque leur connaissance permet de

* Un exposé aussi précis que clair des diagrammes de Feynman est présenté dans [26].

mieux faire ressortir les particularités de la physique des microparticules et d'illustrer quelques principes fondamentaux de la mécanique quantique (à ce sujet le lecteur se reportera au § 25).

Avant de quitter les diagrammes de Feynman, nous dirons quelques mots sur l'effet dit de *polarisation du vide*. La fig. 6.2 représente le diagramme utilisé pour décrire l'un des processus déterminant l'apparition de cet effet : le photon se transforme en une paire électron-positon virtuelle, qui est ensuite annihilée en redonnant un photon (une des lignes en trait plein reliant les sommets « représente » sur le diagramme l'électron virtuel et l'autre le positon virtuel). Les composantes de cette paire de microparticules virtuelles peuvent engendrer durant leur temps de vie des photons virtuels qui, à leur tour, peuvent engendrer de nouvelles paires électron-positon virtuelles et ainsi de suite. De ce fait le vide n'est pas vraiment « vide » mais « rempli » de charges électriques virtuelles qui exercent vis-à-vis des charges extérieures (bien réelles) un effet d'écran. La confirmation expérimentale de cet effet est une meilleure preuve de la valeur du concept des particules virtuelles.

Fig. 6.2.

Les microparticules et le milieu ambiant. Nous avons déjà indiqué que l'une des principales particularités des microparticules consiste en ce que leur comportement est pour une large part aléatoire, de sorte que la mécanique quantique est une théorie essentiellement statistique usant du calcul des probabilités. Mais quelle est la *cause* de l'élément aléatoire dans le comportement d'une microparticule ? On peut donner la réponse suivante : on dira d'une façon imagée que les aléas des microphénomènes s'expliquent par les interactions de la microparticule avec tout ce qui l'entoure. La mécanique quantique a ceci de particulier qu'aucune microparticule et qu'aucun microphénomène ne peuvent être considérés comme isolés et indépendants du milieu ambiant. In [27] on note à ce propos, « *la cause du caractère statistique de la mécanique quantique est la même que celle de la mécanique statistique classique, à savoir le grand nombre de liens exerçant leur influence sur le mouvement de la particule. En mécanique quantique une particule que l'on suppose être libre n'est en réalité libérée que des actions dynamiques. Mais elle est soumise à l'action de forces aléatoires déterminant des fluctuations dans son comportement; ces fluctuations sont prises en compte par les relations d'incertitude* ».

Voyons quelle est la *nature* des actions aléatoires auxquelles se trouvent soumises les microparticules. Dans la théorie quantique des champs elle se manifeste explicitement sous forme de l'interaction de la microparticule avec le vide (rappelons que le vide est « rempli » de charges virtuelles). On peut dire que la microparticule interagit

avec le milieu qui l'entoure par l'intermédiaire des microparticules virtuelles.

Dès lors le lecteur doit considérer comme toute naturelle l'interprétation que nous avons donnée ci-dessus du dualisme onde-corpuscule : ce sont les potentialités de la microparticule de manifester soit ses propriétés corpusculaires, soit ses propriétés ondulatoires selon les conditions extérieures, donc en fonction du milieu ambiant. Une telle interprétation suppose l'existence de liens organiques entre la microparticule et son entourage, puisque le caractère propre d'une microparticule se révèle sous l'une ou l'autre forme selon les conditions concrètes dans lesquelles elle se trouve, donc selon l'ambiance.

La mécanique quantique établit qu'il est impossible de subdiviser à l'infini les corps et les phénomènes à l'étude ; cette conclusion doit s'interpréter en fin de compte également par l'interaction de la microparticule avec le milieu ambiant. Cela signifie qu'à un certain stade de l'étude les objets physiques ne peuvent plus être considérés comme isolés du monde. Il est opportun de rappeler à ce propos la conclusion que nous avons tirée au § 3 au sujet des transitions quantiques : « Pendant l'interaction d'un électron avec des photons, en toute rigueur on ne peut plus parler isolément ni d'électron ni de photon, puisqu'on n'a affaire qu'à une certaine entité unique, et on ne doit considérer que cette entité unique sans chercher à aller plus loin. »

La mécanique quantique rétablit l'idée que nous impose l'expérience de la vie : l'idée de l'*unité du monde* et de la *corrélation universelle des phénomènes*, idée que la théorie classique avait notablement ébranlée. Les frontières bien définies qui existaient jusqu'alors entre les ondes et les corpuscules, les particules et les champs, entre les particules soumises à l'étude et le milieu ambiant s'estompent et on voit apparaître au premier plan les transmutations de la matière. On doit reconnaître toute la justesse de la remarque de Bohm [28] : « *Il semble que l'on doive renoncer à l'idée d'une subdivision de l'Univers en parties distinctes pour la remplacer par l'idée de l'unité de l'Univers. Partout où les phénomènes quantiques jouent un rôle essentiel, nous constaterons que les différentes « parties » de l'Univers peuvent se modifier notablement dans le temps du fait de l'existence entre elles de liens inéluctables et indestructibles. Nous aboutissons alors à l'image d'un Univers indivisible, constituant un tout mais souple et continuellement changeant.* »

INTERMÈDE

PEUT-ON ÉLABORER UN MODÈLE REPRÉSENTATIF DE MICROPARTICULE ?

On retrouve ici les mêmes personnages que dans l'intermède précédent.

AUTEUR : Le fait qu'il est impossible de donner une interprétation classique d'une microparticule (cf. § 5) implique une réponse négative à la question posée : peut-on élaborer un modèle concret d'une microparticule ?

CLASSIQUE : Je ne vois cependant pas pourquoi on ne peut élaborer un modèle concret d'une microparticule qui permettrait d'expliquer ses différentes propriétés, y compris le spin, l'instabilité, les propriétés d'onde, etc. J'admets qu'un tel modèle serait fort compliqué. Il est possible que nos connaissances sur les microparticules sont insuffisantes pour bâtir un modèle satisfaisant. Mais pourquoi donc ne pouvons-nous croire à la possibilité même d'élaborer un tel modèle ?

AUTEUR : Il existe pour cela des raisons importantes. Je n'en citerai que deux. Premièrement, toute élaboration d'un modèle présuppose en fin de compte que l'on puisse détailler l'objet de l'étude, qu'il s'agisse d'une particule ou d'un processus. Or nous avons montré ci-dessus qu'un des traits caractéristiques des microparticules et des microprocessus est qu'il est par principe impossible de les détailler à l'infini. Cette circonstance d'une signification profonde a toujours été prêchée par Bohr, qui écrivait notamment dans un article intitulé « Physique quantique et philosophie » [6] : « *Depuis la découverte par Planck du quantum élémentaire d'action commença une nouvelle époque pour les sciences physiques. Cette découverte révéla que les processus à l'échelle atomique présentent un caractère entier, qui dépasse de loin l'ancienne idée d'une subdivision limitée de la matière. Il est devenu évident que les descriptions concrètes et imagées propres aux théories classiques ne sont que des idéalisations...* » Il convient de remarquer que « le caractère entier » évoqué par Bohr est intimement lié à l'identité des microparticules.

La seconde particularité des microparticules se rapporte à l'existence d'interactions inévitables avec leur entourage, ce qui a pour conséquence la dépendance de certaines propriétés des microparticules avec les conditions extérieures. On doit considérer ces propriétés comme des potentialités qui ne se réalisent que dans des conditions extérieures appropriées. On peut se demander alors comment on pourrait représenter ces potentialités dans le cadre d'un certain modèle.

CLASSIQUE : Je dois reconnaître que ces considérations constituent des arguments solides contre l'idée de l'élaboration d'un modèle de microparticule. Néanmoins l'esprit même de la mécanique quantique, qui rejette toute possibilité de rendre concrètes ses conceptions, me déplaît. Il me semble que cela introduit des éléments subjectifs dans la description du monde réel. Prenons, par exemple, l'affirmation suivante : selon les conditions dans lesquelles il se trouve, l'électron peut se comporter tantôt comme une onde, tantôt comme un corpuscule. Tout dépend des conditions, notamment des conditions d'observation. On est induit à penser que l'électron est non pas une réalité objective, mais plutôt quelque chose de subjectif, dont l'aspect change suivant qu'on le « regarde » de telle ou telle autre façon.

AUTEUR : Vous avez sûrement tort. Pour commencer, vous perdez de vue que l'électron possède des caractéristiques parfaitement déterminées : sa masse de repos, sa charge électrique, son spin, etc. L'électron est stable et fait partie du groupe des fermions. Quant au modèle de l'électron, il est vrai qu'il n'en existe pas. Cependant, la mécanique quantique, tout en rejetant l'idée de tout modèle concret de l'électron, ne sacrifie nullement l'objectivité à la subjectivité. Mais l'électron est un objet physique extrêmement complexe qui dans des conditions différentes, notamment suivant les conditions dans lesquelles on l'obser-

ve, révèle des aspects différents de son entité; je dois expressément souligner que ces différents aspects existaient objectivement comme des potentialités bien avant que l'observateur ait vu le jour. En faisant preuve de lucidité devant ces difficultés, on doit reconnaître, entre autres, qu'il est impossible d'élaborer un véritable modèle de l'électron.

CLASSIQUE: Peut-on sérieusement parler d'un objet sans pouvoir se faire une idée de ce qu'il est? N'est-il pas étrange que nous étudions, par exemple, le comportement des électrons dans un cristal, sans savoir au juste ce qu'est un électron.

AUTEUR: Je ne suis pas d'accord avec votre affirmation que nous ne savons pas au juste ce qu'est un électron. J'ai cité tout à l'heure certaines des caractéristiques et des propriétés de l'électron que nous connaissons bien. Dans les paragraphes précédents nous avons examiné plus en détail les propriétés des microparticules en général et plus particulièrement celles de l'électron (nous reprendrons leur étude par la suite). En fait nous savons beaucoup de choses concernant l'électron et en particulier nous sommes en mesure de comprendre son comportement dans un cristal; en témoigne l'existence d'un grand nombre de dispositifs à semiconducteurs qui trouvent de nombreuses applications pratiques. Vous voyez bien que l'absence d'un modèle concret de l'électron n'a pas empêché ces réalisations. Mais on peut aller plus loin et affirmer que « *la connaissance de phénomènes naturels où la constante de Planck joue un rôle essentiel, n'est possible que si on renonce dans une large mesure à des descriptions concrètes* ». Notons que nous venons de citer une phrase de Heisenberg, dont les travaux font une large place aux questions relatives à la concrétisation des concepts de la mécanique quantique.

CLASSIQUE: La mécanique quantique, renonçant à tout modèle, ne risque-t-elle pas de perdre dans une certaine mesure sa base matérielle? Et ne court-on pas le risque de ne voir subsister que des équations et des symboles mathématiques abstraits?

AUTEUR: Je comprends l'origine de vos doutes. Vous n'admettez que les *extrêmes*, ou bien des modèles concrets, ou bien des abstractions mathématiques. Le modèle doit refléter la totalité ou la presque totalité des caractères distinctifs de l'original, sinon il ne vaut rien. C'est bien là l'origine de vos doutes, qui sont d'ailleurs bien caractéristiques de ce mode de pensée. Mais l'approche de la mécanique quantique à ces problèmes est plus souple, c'est une approche *dialectique*.

CLASSIQUE: Je ne vois pas très bien ce que vous entendez par là.

AUTEUR: Je cherche à dégager deux idées. La première est la suivante: bien qu'il n'existe pas de modèle concret d'une microparticule, cela n'empêche nullement d'utiliser en mécanique quantique des *représentations imagées*.

CLASSIQUE: J'avais donc bien raison?

AUTEUR: Il s'agit ici de tout autre chose. La mécanique quantique se fonde sur l'idée qu'aucun modèle, aussi sophistiqué soit-il, ne saurait refléter toutes les particularités d'une microparticule. Aussi utilise-t-elle des modèles *conventionnels*, tantôt l'un, tantôt l'autre, tout en reconnaissant le *caractère relatif* de tous les modèles. Ce qui importe, c'est que tout modèle mis en œuvre reflète l'un des aspects de l'entité d'une particule ou d'un phénomène. Aussi lorsque nous étudions les transitions électroniques entre les bords de la bande interdite d'un semiconducteur, assimilons-nous sans ambages les électrons à des corpuscules effectuant des sauts le long de l'échelle des énergies. Lorsque nous étudions la propagation des électrons à travers un réseau cristallin parfait, nous utilisons le concept d'onde. Quant à la diffusion des électrons par les vibrations élastiques d'un cristal, il nous est à nouveau commode d'utiliser le « langage corpusculaire » en usant du modèle de collisions entre deux espèces de corpuscules — les électrons et les phonons. Un autre exemple d'utilisation de modèles conventionnels est celui du nuage électronique dans l'étude de l'électron d'un atome. Ces exemples montrent que la mécanique quantique fait assez largement appel

aux modèles. Mais ces modèles ne sont pas pris à la lettre, ce sont des modèles conventionnels et relatifs.

CLASSIQUE: C'est bien, et quelle est la seconde idée dont vous vouliez me parler?

AUTEUR: La seconde idée est la suivante: la mécanique quantique utilise au même titre les modèles conventionnels et les abstractions mathématiques. J'insiste que c'est au même titre, puisque c'est là que se situe la rupture entre la nouvelle physique et les conceptions classiques. En relevant l'importance du rôle heuristique que jouent les mathématiques dans la nouvelle physique, à la différence de l'époque des conceptions classiques où elles ne pouvaient jouer ce rôle, Vavilov écrivait [29]: « *Pour arriver à une interprétation imagée, les conceptions et les modèles usuels nous font bien défaut, mais l'énorme domaine de la logique incorporée dans des formules mathématiques se trouve à notre disposition; sa mise en œuvre permet non seulement de mettre de l'ordre dans ce monde nouveau que l'on a peine à comprendre, mais crée la possibilité de faire des prévisions physiques valables.* »

CLASSIQUE: Mais il n'y a donc rien qui soit déterminé dans votre physique!

AUTEUR: Précisons, rien qui soit prédéterminé. L'approche de la nouvelle physique à l'étude du monde objectif se passe de ce que l'on pourrait appeler les « préjugés classiques ». Elle fait preuve de souplesse en utilisant les moyens les plus divers: les modèles et les abstractions mathématiques. On serait tenté de dire « rien de ce qui est humain ne lui est étranger ».

On pourrait résumer en disant, d'une part, que dans l'étude des microparticules et des microphénomènes on utilise bien des modèles, et ce assez largement; mais on notera, d'autre part, qu'en mécanique quantique on ne prend jamais les modèles à la lettre, on tient toujours compte qu'ils sont conventionnels, relatifs. Enfin le processus de la connaissance des microphénomènes se base sur *l'unité dialectique des représentations à l'aide de modèles et d'abstractions mathématiques.*

CHAPITRE II

LES FONDEMENTS PHYSIQUES DE LA MÉCANIQUE QUANTIQUE

§ 7. Description de certaines expériences ayant une importance de principe

Les études expérimentales et le système d'expériences ayant un caractère de principe. Les conceptions de la mécanique quantique s'appuient sur une masse de résultats expérimentaux accumulés pendant plus d'un demi-siècle, couvrant la fin du XIXe siècle et la première moitié du XXe siècle. Parmi cette multitude d'expériences on en décèle que l'on peut considérer comme des jalons sur la voie du progrès, donc des expériences cruciales. On peut citer, par exemple, les expériences suivantes, liées au problème du rayonnement du corps noir: celles de O. Lummer et de A. Pringsheim en conjonction avec les études théoriques de Planck (1900); les expériences de Franck et Hertz portant sur les collisions non élastiques entre les électrons et les atomes (1914); les études expérimentales de Millikan de l'effet photoélectrique qui ont confirmé les prévisions théoriques d'Einstein (1914); les expériences de Stern et Gerlach sur le dédoublement des jets atomiques dans un champ magnétique non homogène (1921); la mesure par Compton de la longueur d'onde des rayons X diffusés par la matière (1923); les expériences de Davisson, Germer et Tartakovsky sur la diffraction des électrons (1927) *. Toutes ces expériences (et bien d'autres encore qui sont moins connues) constituent le fondement sur lequel pendant des décennies s'élaborait et se perfectionnait, en se libérant de toutes sortes de « paradoxes », la théorie quantique, jusqu'à ce qu'elle devienne telle que nous la connaissons aujourd'hui.

Lorsque aujourd'hui, disposant de la théorie quantique moderne, nous examinons les recherches expérimentales qui lui ont précédé, il est utile d'essayer de donner une *vue d'ensemble* des principaux résultats qui avaient été obtenus; laissant de côté tous les aspects non essentiels de ces expériences, il est tentant de systématiser les *expériences ayant une importance de principe* pour révéler les principales conceptions de la mécanique quantique. C'est ce que nous nous proposons de faire dans ce paragraphe. La systématisation que nous avons entreprise est basée sur des expériences réelles; il ne faut

* Ces expériences sont décrites in [30].

cependant pas chercher à établir des corrélations univoques entre les « expériences de principe » que nous décrivons et les expériences qui ont été réellement effectuées à une certaine époque dans un laboratoire déterminé. Ce que nous appelons « expérience de principe » doit être considéré comme une généralisation de plusieurs expériences concrètes. Aussi les détails concernant la réalisation des dispositifs expérimentaux ne sont-ils pas essentiels, de même que ne le sont les réminiscences historiques.

L'utilisation didactique d'un système d'expériences de principe se trouve justifiée, à notre sens, par les circonstances suivantes. Premièrement, un système d'expériences de principe, étant débarrassé de toutes les circonstances secondaires qui accompagnent toute recherche scientifique (impasses, controverses, etc.), permet d'en dégager l'essentiel qui constitue la base expérimentale de la théorie. D'autre part, les conceptions de la mécanique quantique ont produit un tel bouleversement dans nos idées sur la structure et les propriétés de la matière qu'il ne serait pas toujours justifié de tirer des conclusions décisives d'expériences isolées. On peut dire que le système de conceptions de la mécanique quantique se base non sur des expériences isolées (même si on les appelle des expériences décisives), mais bien sur *tout un ensemble d'expériences*. Puisqu'il est indispensable d'analyser tout l'ensemble des expériences, il est tout indiqué d'utiliser pour cela un certain système d'expériences ayant un caractère de principe.

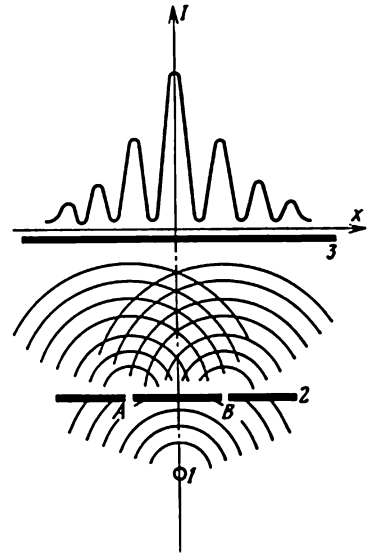


Fig. 7.1

Expérience n° 1 (microparticules dans un interféromètre). Nous considérerons pour commencer l'expérience bien connue sur l'interférence des ondes lumineuses. La fig. 7.1 représente le schéma de l'*interféromètre* le plus simple qui soit. Sur ce schéma on a désigné par *1* une source ponctuelle d'un rayonnement monochromatique, par *2* un écran comportant deux fentes étroites A et B, par *3* l'écran détecteur servant à enregistrer l'intensité de la lumière incidente. La variation de l'intensité de la lumière enregistrée est représentée par la courbe $I(x)$. L'allure de la courbe $I(x)$, caractéristique d'un phénomène d'interférence, s'interprète aisément par la théorie ondulatoire classique : l'onde lumineuse issue de *1*, en atteignant l'écran *2*, « transforme » les fentes A et B en deux sources de nouvelles ondes

lumineuses qui, s'additionnant, forment sur l'écran *3* un *diagramme d'interférence* caractérisant la répartition de l'intensité lumineuse.

Rappelons que l'interférence de la lumière avait été observée dès le XVIIe siècle (Grimaldi) et son interprétation sur la base du concept d'onde date du début du XIXe siècle (Young). Depuis l'expérience schématisée par la fig. 7.1 porte le nom d'*expérience de Young*.

On peut se demander quel rapport peut-il exister entre la mécanique quantique et une expérience qui a été réalisée et interprétée il y a si longtemps. Il est facile de montrer qu'il y a entre elles une corrélation bien nette.

Réduisons en effet l'intensité de la lumière émise par la source *1*. L'éclairement de l'écran *3* deviendra évidemment de plus en plus faible, mais le caractère interférentiel de la courbe $I(x)$ *se conserve*. En augmentant le temps d'exposition, on peut, du moins en principe, obtenir une figure d'interférence pour une intensité lumineuse indéfiniment petite. Or cette dernière affirmation est loin d'être triviale, puisqu'à mesure que l'on réduit l'intensité du faisceau lumineux, on réduit en même temps le nombre de photons qu'il renferme et on arrive en fin de compte à une situation où on devra considérer non plus des ondes de lumière mais des photons isolés. Or l'expérience montre que l'allure de la courbe ne change cependant pas lors d'une diminution aussi importante que l'on veut de l'intensité lumineuse. La répartition des points d'impact des photons est telle que l'on obtient sur l'écran détecteur une figure d'interférence en tout point semblable à celle que produisent les ondes lumineuses.

En outre, on observera un phénomène d'interférence même si on dispose en *1* (fig. 7.1) une source d'électrons mono-énergétiques. Dans ce cas également on peut réduire autant que l'on voudra l'intensité du faisceau d'électrons. On peut même réaliser une expérience où les électrons passent *un par un* à travers des fentes de l'interféromètre. L'étude de la répartition des points d'impact des électrons sur l'écran détecteur au bout d'un temps de pose suffisant montre que dans ce cas également on obtient une figure d'interférence [la courbe $I(x)$] caractéristique. Les expériences où l'on utilise d'autres microparticules (protons, neutrons, etc.) fournissent des résultats analogues.

Partant des résultats d'observation du comportement des microparticules dans l'interféromètre, on peut conclure que le phénomène d'interférence se manifeste pour *toutes* les microparticules et que l'interprétation de ce phénomène doit se baser non sur les propriétés d'une collectivité de microparticules, mais sur celles des microparticules *elles-mêmes*.

Essayons de suivre pas à pas le mouvement d'une seule microparticule (d'un électron, par exemple) dans l'interféromètre représenté (fig. 7.1). Partant de la source ponctuelle *1*, l'électron passe à travers

les fentes de l'écran *2* et se laisse enregistrer en un point x de l'écran *3*. En répétant l'expérience avec un grand nombre d'électrons individuels, nous pouvons constater deux faits importants.

Le premier est qu'il est impossible de prévoir en quel point x de l'écran sera enregistré un électron donné. Chacun des électrons se trouve dans les mêmes conditions expérimentales (précisons que les électrons traversent l'interféromètre un par un), et cependant chaque électron « se comporte à sa manière », sans qu'il soit possible de prédire quel sera son comportement. Nous attirons l'attention du lecteur qu'il s'agit d'électrons pris un par un. Mais si l'on somme les observations concernant un grand nombre d'électrons passant successivement à travers l'interféromètre, on arrive à déceler un certain ordre dans la répartition de leurs impacts sur l'écran *3*; cette répartition se laisse décrire par une courbe d'interférence $I(x)$. Le résultat est le même, que l'on observe la répartition des impacts d'un grand nombre d'électrons parvenant un par un sur l'écran ou celle des impacts des électrons d'un faisceau. Il s'ensuit que l'indétermination du comportement d'*une seule* microparticule s'accompagne d'un comportement prévisible dès que l'on a affaire à une *multitude* de microparticules.

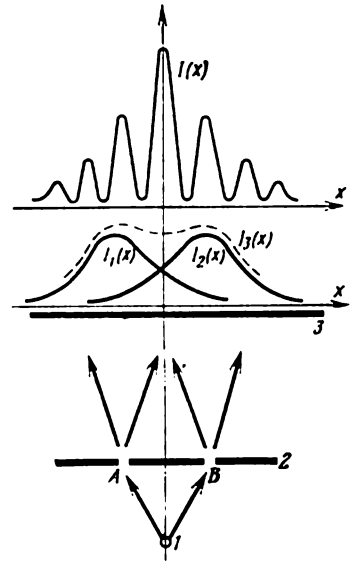


Fig. 7.2.

Le second fait important concerne certaines particularités du passage de l'électron à travers les fentes de l'écran *2*. Obturons la fente B; on observera alors sur l'écran détecteur une répartition d'impacts décrite par la courbe $I_1(x)$ (fig. 7.2). Découvrons la fente B, mais obturons la fente A; on obtient alors la répartition $I_2(x)$. Lorsque les deux fentes sont ouvertes, nous obtetons une répartition *caractéristique* $I(x)$ du phénomène d'interférence et non pas une répartition *égale à la somme* $I_1(x) + I_2(x)$. [Cette somme est représentée fig. 7.2 par la courbe $I_3(x)$]. C'est ce dernier résultat qui est en tout point remarquable. En effet, même si nous admettons que chacun des électrons passe par l'une des deux fentes, l'existence d'une figure d'interférence $I(x)$ nous impose d'admettre que l'électron qui passe à travers l'une des fentes « sent » la présence de l'autre fente. S'il n'en était pas ainsi, chaque électron passant à travers l'une des fentes devrait être « insensible » à ce que l'autre fente est

ouverte ou fermée ; mais alors, les deux fentes étant ouvertes, la répartition des impacts devrait avoir l'allure non d'une courbe d'interférence, mais celle de la courbe $I_3(x) = I_1(x) + I_2(x)$ [puisque tous les électrons qui passent à travers la fente A devraient donner la répartition $I_1(x)$ et tous ceux qui sont passés à travers la fente B devraient donner la répartition $I_2(x)$; on aurait observé alors sur l'écran détecteur la répartition $I_3(x)$]. Comme il est absurde de parler de « sensations » d'un électron, on est amené à la conclusion suivante : la répartition interférentielle $I(x)$ enregistrée lorsque les deux fentes sont ouvertes est due à ce que chaque électron s'ingénie à passer à travers les deux fentes à la fois.

Le fait d'arriver à une telle conclusion ne facilite rien, puisqu'il reste incompréhensible comment un seul électron peut passer simultanément à travers deux fentes distinctes. On peut naturellement supposer que l'électron ayant traversé l'une des fentes rebrousse chemin, passe à travers l'autre fente, puis repasse à travers la première (il décrirait une espèce de boucle passant par les deux fentes). On peut également supposer qu'à proximité des fentes l'électron se délocalise spatialement et passe en partie par l'une et en partie par l'autre fente, puis, arrivant à proximité de l'écran détecteur, se localise à nouveau dans l'espace (ce qui revient à dire que l'électron se scinde temporairement en deux « moitiés »). Il est vraiment inutile de démontrer le caractère artificiel de ces tentatives de modeler le passage de l'électron à travers les deux fentes de l'écran, surtout si on considère la mise en œuvre d'interféromètres plus compliqués. Ainsi dans le cas de l'interféromètre de Michelson on serait amené à supposer qu'une « moitié » de la microparticule se dirige vers l'un des miroirs réfléchissants, et l'autre « moitié » vers le deuxième miroir (donc en sens inverse de la première « moitié »).

Nous voyons donc que l'existence des courbes d'interférence $I(x)$ a embrouillé la question concernant le passage d'une microparticule à travers les deux fentes d'un écran. Si la microparticule passe à travers une seule fente, ou bien on ne devrait pas observer de figures d'interférence, ou bien on devrait admettre que la microparticule possède la faculté mystérieuse de « sentir » l'existence d'une seconde fente. La seule conclusion raisonnable que l'on puisse tirer du fait expérimental de l'existence de figures d'interférence consiste à admettre que la microparticule traverse les deux fentes à la fois, bien que le mécanisme d'un comportement aussi singulier ne soit pas élucidé.

Dans une situation aussi confuse seule une expérience directe pourrait permettre de tirer les choses au clair ; il faudrait « épier » comment fait l'électron pour traverser un écran muni de fentes. On a effectivement réalisé des expériences poursuivant ce but. Voyons ce qu'il en a résulté.

Expérience n° 2 (objectif : «épier » les démarches d'une microparticule dans un interféromètre). Imaginons qu'à proximité des fentes A et B de l'écran *2* on ait disposé des sources lumineuses *4* et des photorécepteurs *5* (fig. 7.3), destinés à « épier » le passage de l'électron à travers les fentes (les photorécepteurs enregistrent la lumière diffusée par l'électron). Si l'électron passe simultanément à travers les deux fentes, les deux photorécepteurs enverront simultanément des signaux. Si l'électron passe à travers une seule des deux fentes, un seul des photorécepteurs enverra son signal, et on saura par quelle fente est passé l'électron.

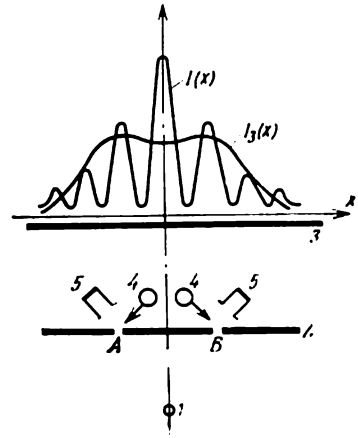


Fig. 7.3.

Nous disposons donc une source d'électrons en *1*, nous allumons nos sources lumineuses *4* et nous attendons les signaux des photorécepteurs *5*. Nous supposerons que les électrons arrivent un par un à une cadence telle que la source n'émet un électron que lorsque l'électron précédent a déjà atteint l'écran enregistreur.

Que donne cette expérience ? A chaque fois *un seul* des photorécepteurs émet un signal (le photorécepteur de gauche ou de droite) et en aucun cas on n'observe la mise en branle simultanée des deux. Il s'avère que l'électron passe à travers une seule fente et nous pouvons noter chaque fois par laquelle des deux fentes est passé un électron donné.

Le lecteur pourrait donc s'attendre à ce que pour expliquer le phénomène d'interférence on doive réaffirmer que passant à travers une fente l'électron « sent » la présence de l'autre fente. Ne précipitons pas les choses et poursuivons jusqu'au bout notre expérience, c'est-à-dire jusqu'à ce que le nombre d'impacts sur l'écran détecteur *3* devienne suffisamment grand pour bien caractériser la répartition de ces impacts. Nous constaterons alors avec surprise qu'au lieu d'une courbe d'interférence $I(x)$ nous avons obtenu une courbe $I_3(x)$, somme des courbes $I_1(x)$ et $I_2(x)$.

Recommençons l'expérience en débranchant les sources lumineuses *4* (nous ne pouvons donc plus « épier » les démarches des électrons). Et nous retrouverons alors sur l'écran détecteur *3* la courbe d'interférence $I(x)$.

Donc lorsque les sources lumineuses sont allumées, il n'y a pas d'interférence et lorsqu'elles sont débranchées il y a interférence. Cela signifie que dès que nous cherchons à fixer le passage des électrons à travers nos deux fentes, le phénomène d'interférence disparaît.

Donc le fait d'observer le comportement des électrons à proximité des fentes *fait disparaître l'interférence*!

Notons que l'altération du mouvement des électrons qui se manifeste sous l'influence des sources lumineuses trouve une explication physique simple: elle résulte des collisions des photons avec les électrons que nous cherchons à « contrôler ». Tout processus de mesure implique irrémédiablement une certaine action sur l'objet de la mesure. La seule chose qui importe, c'est de savoir s'il est possible de rendre cette action suffisamment faible. Aussi peut-on supposer que notre expérience était trop grossière et que l'on devrait utiliser un procédé d'observation des électrons plus fin, suffisamment fin pour que la figure d'interférence n'en soit pas détruite.

Mais comment faire pour réduire les effets dus à l'action d'un photon sur un électron ? Il est évident qu'une diminution de l'intensité lumineuse ne peut être d'aucun secours; en effet l'intensité lumineuse était liée au nombre de photons dans le faisceau lumineux, sa réduction ne peut que faire croître le nombre d'électrons non « enregistrés ». Il faudrait donc diminuer l'énergie des photons. Or cela exige une augmentation de la longueur d'onde du rayonnement utilisé, ce qui s'accompagne d'une plus grande indétermination sur la position des photons (la position spatiale du photon n'est déterminée qu'à une longueur d'onde près). Si la longueur d'onde devient supérieure à la distance de séparation des fentes, le photon devient inapte à contrôler une fente donnée.

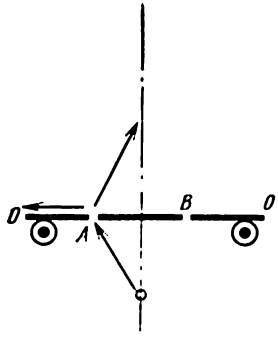


Fig. 7.4.

Dans ces conditions on pourrait, peut-être, imaginer une autre expérience qui n'aurait pas recours à la diffusion des photons sur les électrons? Ne pourrait-on pas réaliser un écran extrêmement léger dans lequel on pourrait pratiquer des fentes et qui se déplacerait à droite ou à gauche sous l'action des chocs d'électrons isolés! Si l'électron venait à passer à travers la fente de gauche, l'écran subirait alors un recul vers la gauche et s'il venait à passer à travers la fente de droite la force de recul déplacerait l'écran vers la droite (fig. 7.4). Mais si l'électron arrivait à passer à travers les deux fentes à la fois l'écran devrait rester immobile. Il ne resterait alors qu'à observer les déplacements de cet écran. On pourrait penser que ce procédé permettrait, du moins en principe, d'atteindre à l'objectif que l'on s'était posé — on a imaginé une expérience n'affectant pas de façon grossière le comportement des électrons. Néanmoins il serait vain de réaliser une telle expérience. Pour nous en rendre compte, il suffit de nous rappeler la relation d'incertitude concernant l'im-

pulsion et la coordonnée de position. Il s'ensuit de cette relation que si les conditions de l'expérience sont telles qu'il devient possible d'enregistrer l'impulsion de l'écran résultant de l'effet de recul dû à l'impact de l'électron, ces mêmes conditions entraînent une incertitude sur la position de l'écran le long de la droite *OO* (fig. 7.4). Par conséquent, le déplacement de l'écran ne permettrait pas de tirer des conclusions valables concernant le moyen utilisé par l'électron pour passer au travers des fentes. D'autre part, si on décidait de fixer la position de l'écran sur l'axe *OO* il est clair que la mesure de l'impulsion de son recul deviendrait impossible.

On a vainement cherché à imaginer une expérience qui permettrait de « contrôler » le passage de l'électron à travers les fentes d'un écran sans le soumettre à des actions trop fortes (afin de ne pas détruire l'effet d'interférence). Cependant toutes les tentatives ont échoué. On est donc bien obligé de reconnaître que la conclusion selon laquelle toute observation du comportement de l'électron à proximité des fentes entraîne la disparition de l'interférence, revêt un caractère de principe. Cela veut dire qu'il est par principe impossible d'éliminer l'effet de destruction de l'interférence accompagnant toute observation (ou mesure) d'une microparticule.

Un petit intermède

LECTEUR : On n'est donc pas parvenu à tirer au clair comment l'électron arrive à passer à travers les fentes de l'écran —par l'une d'elles ou par les deux à la fois?
AUTEUR : C'est exact, nous n'y sommes pas parvenus.
LECTEUR : Mais alors l'expérience de principe n° 2 n'a pas atteint son but! Et fallait-il alors en parler?
AUTEUR : Bien qu'elle n'ait pas permis de trancher la question qui nous intéresse, elle n'a pas été inutile. Il en résulte tout simplement que la question a été formulée d'une façon incorrecte. Cela nous montre que l'on ne peut interroger la nature sur n'importe quoi.
LECTEUR : Ainsi, c'est ce résultat négatif qui donne tout son sens à cette expérience?
AUTEUR : C'est déjà notable. Cependant nous verrons dans ce qui suit que cette expérience compte aussi un résultat positif de très grande importance. En fait nous y cherchions une chose et l'expérience nous a donné tout autre chose.
LECTEUR : Quoi donc?
AUTEUR : N'allons pas trop vite. Menons d'abord à bonne fin notre série d'expériences de principe.

Expérience n° 3 (passage de photons à travers un polariseur). Faisons passer un faisceau lumineux à travers un polariseur, un cristal de tourmaline, par exemple. A la sortie du cristal nous obtenons un faisceau de la lumière *polarisée rectilignement*. La direction de la polarisation du faisceau est déterminée par l'orientation relative du polariseur et du faisceau (la direction de la polarisation se confond avec l'axe du polariseur). Désignons par I l'intensité de la lumière polarisée rectilignement.

Disposons maintenant sur le trajet du faisceau de lumière de polarisation rectiligne un second polariseur et considérons les trois cas suivants : *a*) l'axe du second polariseur est parallèle à l'axe du premier ; *b*) l'axe du second polariseur est perpendiculaire à l'axe du premier ; *c*) l'axe du second polariseur forme un angle α avec l'axe du premier polariseur. Nous allons maintenant mesurer l'inten-

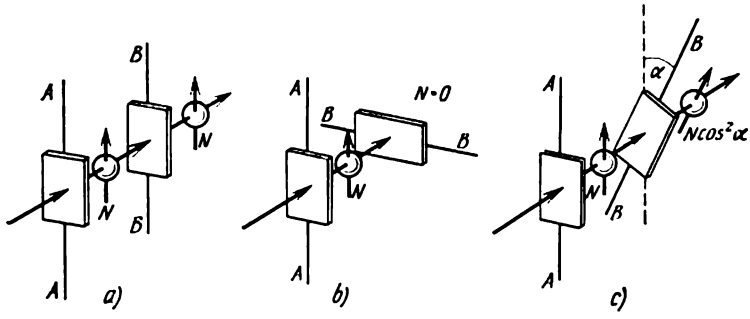


Fig. 7.5.

sité de la lumière sortant du second polariseur. Dans le cas *a*) nous mesurons une intensité I, dans le cas *b*) l'intensité est nulle et dans le cas *c*) l'intensité du flux lumineux est $I \cos^2 \alpha$, la lumière étant polarisée le long de l'axe du second polariseur. Ces trois cas sont illustrés par la fig. 7.5 sur laquelle AA représente l'axe du premier polariseur et BB l'axe du second.

Cette expérience est bien connue en optique classique, mais, de même que l'expérience de Young, elle intéresse directement la mécanique quantique. Comme dans l'expérience d'interférence, nous diminuerons l'intensité du faisceau primaire jusqu'à ce qu'à travers notre dispositif les photons passent un par un. Examinons ce qui se passe dans les trois cas de la fig. 7.5, lorsqu'on a affaire à des photons individuels.

Rappelons tout d'abord que tout photon est caractérisé par une polarisation déterminée, qui correspond à la polarisation de l'onde lumineuse classique dont faisait partie le photon considéré. Cela signifie notamment qu'à la sortie du premier polariseur les photons présentent une polarisation rectiligne (donc le long de l'axe de ce polariseur). Ce sont ces photons-là que nous utiliserons dans nos expériences et nous les appellerons « photons primaires ».

Dans le cas *a*) le photon primaire traverse toujours le second polariseur, tandis que dans le cas *b*) il ne le fait jamais. Ces résultats ne sont nullement étonnants. Voyons ce qui se passe dans le cas *c*). Dans ce troisième cas le photon peut aussi bien passer que ne pas passer à travers le deuxième polariseur. Il est alors absolu-

ment impossible de prédire laquelle de ces deux alternatives sera réalisée (c'est-à-dire que le photon considéré passe ou ne passe pas à travers le deuxième polariseur). Si le photon traverse le deuxième polariseur, sa polarisation en sera modifiée et sera dirigée le long de l'axe du deuxième polariseur. Le comportement d'un photon primaire donné est donc en principe imprévisible.

Considérons maintenant N photons primaires et voyons ce qu'il en advient lorsqu'ils traversent le deuxième polariseur dans le cas du schéma *c*). Il apparaît que si le nombre N de photons est suffisamment grand, on peut prédéterminer avec une bonne précision le nombre de photons qui réussissent à traverser le polariseur ; ce nombre est voisin de $N \cos^2 \alpha$. Il est opportun de rappeler la remarque que nous avons déjà faite que tandis que le comportement d'une microparticule unique est imprévisible, celui d'un grand nombre de microparticules peut être prévu (voir expérience n° 1). On peut dire qu'il existe une certaine probabilité de ce qu'un photon primaire arrive à traverser le deuxième polariseur ; cette probabilité est égale à $\cos^2 \alpha$.

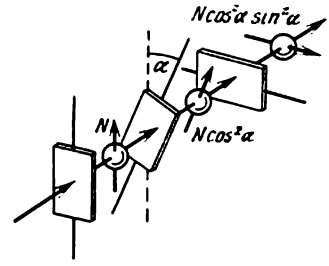


Fig. 7.6.

Compliquons notre expérience en ajoutant au montage du schéma de la fig. 7.5, *c* un troisième polariseur dont l'axe sera perpendiculaire à l'axe du premier polariseur. Ce système de trois polariseurs est représenté fig. 7.6. Soit N le nombre de photons primaires (de photons ayant traversé le premier polariseur). A la sortie du deuxième polariseur il ne subsistera, d'après ce qui a été dit ci-dessus, que $N \cos^2 \alpha$ photons ; la direction de polarisation de ces photons coïncide avec l'axe du deuxième polariseur. En poursuivant ces mêmes raisonnements, nous pouvons conclure qu'à la sortie du troisième polariseur nous trouverons $N \cos^2 \alpha \sin^2 \alpha$ photons, polarisés le long de l'axe du troisième polariseur. L'expérience confirme cette conclusion.

Il nous semble qu'il n'y a rien d'étonnant dans tout cela (en supposant, bien entendu, que l'on ne s'étonne plus de ce que l'on se trouve en présence de deux alternatives imprévisibles du comportement de chacun des photons pris individuellement). Et cependant il existe ici un fait qui est en contradiction avec nos idées habituelles. Si nous enlevons le deuxième polariseur, on ne décèlera aucun photon à la sortie du troisième polariseur. On se trouve alors dans une situation pour le moins curieuse. Les photons passent à travers un certain dispositif où ils sont pour ainsi dire « filtrés » par le deuxième et par le troisième polariseur. Au début nous avons N photons, puis $N \cos^2 \alpha$ photons et enfin il ne reste que $N \cos^2 \alpha \sin^2 \alpha$

photons. Nous enlevons l'un des « filtres », ce qui devrait, semble-t-il, faciliter le passage de photons à travers notre dispositif, mais en fait nous arrivons à ce qu'aucun photon n'arrive à le traverser!

Expérience n° 4 (diffusion de microparticules par des microparticules). Nous allons considérer des collisions *élastiques* entre des microparticules et pour raison de commodité nous les assimilerons à un système de centres de masse. La fig. 7.7 représente le schéma de l'expérience rapporté à un système de centres de masse des particules considérées. *A* et *B* désignent des jets de particules, *1* et 2 des compteurs de particules diffusées, qui sont disposés le long d'une droite perpendiculaire à la direction des jets de particules avant collision. On considère donc la diffusion de particules dans un angle de 90° par rapport au système des centres de masse.

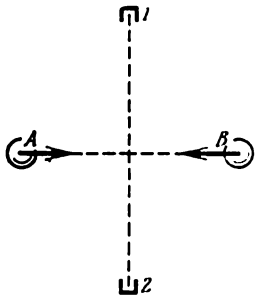


Fig. 7.7.

On doit noter que la représentation du processus dans un système de centres de masse peut être fort différente de celle dans un système de laboratoire. Ainsi dans ce dernier système les compteurs *1* et *2* peuvent ne pas être disposés le long d'une même ligne; dans les conditions d'une expérience réelle on peut n'utiliser qu'un seul jet de particules (par exemple, de particules de l'espèce *A*), tandis que les particules de l'autre espèce (*B*) sont incorporées dans une cible immobile. Il est admis que toute expérience effectuée dans un système de laboratoire est toujours réalisée de telle sorte qu'étant rapportée au système de centres des masse, le schéma des la fig. 7.7 soit valable.

Examinons à l'aide de ce schéma plusieurs exemples de collisions en déterminant dans chaque cas la probabilité de diffusion des particules d'après le nombre de déclenchements simultanés des compteurs *1* et 2.

Premier exemple. Les particules *A* sont des particules α (noyaux d'hélium ^{4}He), les particules *B* sont des noyaux d'hélium ^{3}He; le compteur *1* n'enregistre que les particules α et le compteur *2* n'enregistre que les noyaux ^{3}He. Désignons par w la probabilité de diffusion mutuelle de ces particules.

Deuxième exemple. On utilise les mêmes particules, mais maintenant les deux compteurs peuvent enregistrer aussi bien les particules α que les noyaux ^{3}He. La probabilité de diffusion est dans ce cas égale à $2w$. Ce résultat s'interprète aisément puisqu'il résulte de ce que les deux alternatives illustrées par la fig. 7.8 sont prises en compte.

Troisième exemple. Remplaçons les noyaux ^{3}He par des particules α; on réalise ainsi une diffusion mutuelle de particules α. On pourrait penser que la probabilité de diffusion soit dans ce cas la

même (ou presque la même) que dans l'exemple précédent, soit $2\,w$. Or l'expérience fournit un résultat fort différent $-4w$. La substitution de noyaux ^{4}He aux noyaux ^{3}He, qui paraît « anodine », a fait varier la probabilité de diffusion de deux fois.

On arrive à des résultats encore plus étonnants lorsqu'on tient compte des états de spin des particules entrant en collision (dans le cas de particules α il n'en est pas question puisque ces particules sont dénuées de spin). Aussi prendrons-nous pour exemple la diffusion mutuelle des électrons. Rappelons qu'un électron peut se trouver dans deux états de spin différents ($\sigma = 1/2$, $\sigma = -1/2$). Les électrons générés, par exemple, par émission thermoélectronique ont la même probabilité de se trouver dans l'un ou l'autre de ces états. Les faisceaux de tels électrons sont dits non polarisés ; la moitié des électrons de ces faisceaux ont un spin $\sigma = 1/2$ et l'autre moitié un spin $\sigma = -1/2$. En utilisant des procédés convenables, on arrive à produire des faisceaux électroniques polarisés, dont tous les électrons se trouvent dans le même état de spin.

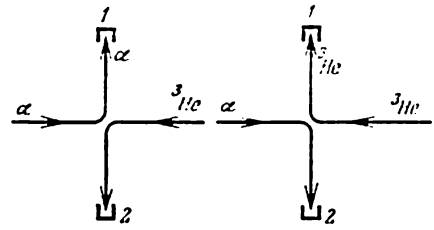


Fig. 7.8.

Revenons maintenant au schéma de la fig. 7.7 et continuons la série de nos exemples. On supposera que l'énergie des électrons entrant en collision est suffisamment petite pour qu'il soit superflu de tenir compte d'un éventuel changement de spin lors des collisions.

Quatrième exemple. Aucun des deux faisceaux électroniques utilisés n'est polarisé. Posons que la probabilité de diffusion soit égale à w_e.

Cinquième exemple. Les deux faisceaux électroniques sont polarisés, mais différemment, les électrons A ont, par exemple, un spin $\sigma = 1/2$ et les électrons B un spin $\sigma = -1/2$. On constate que dans ce cas la probabilité de diffusion est égale à $2\,w_e$.

Sixième exemple. Les deux faisceaux électroniques sont polarisés de façon identique. Les compteurs *1* et *2* restent « muets » — la probabilité de diffusion est nulle!

Nous verrons dans ce qui suit que ces différents résultats d'expériences de diffusion de microparticules reflètent des lois de la mécanique quantique ayant une importance de principe.

Conclusion. Nous venons de décrire un système de quatre expériences simples. A chaque fois nous avons attiré l'attention du lecteur sur le caractère imprévu des résultats obtenus, ne se laissant donc pas interpréter dans le cadre des conceptions classiques. On aurait pu étendre notre système d'expériences de principe en y incluant

des expériences plus compliquées. Nous ne le ferons pas, estimant que les quatre expériences citées révèlent nettement tous les principes fondamentaux de la mécanique quantique.

En nous appuyant sur ces expériences, nous chercherons à établir dans les paragraphes suivants le système des conceptions de la mécanique quantique qui expriment les fondements physiques de cette théorie.

§ 8. Les amplitudes de probabilité des transitions quantiques (formulation des principes fondamentaux)

Le concept d'amplitude de probabilité d'une transition. Etant donné une microparticule, supposons que l'on considère des états *initial* et *final* déterminés (état s et état f). Pour le moment peu importent l'espèce de la microparticule et les caractéristiques concrètes de ces deux états. Nous avons déjà mentionné que la transition d'une microparticule d'un état à un autre est, en général, régie par les lois de *probabilité*. Il est donc opportun d'introduire dans notre raisonnement la *probabilité de transition* $w_{s\to f}$.

En mécanique quantique, à côté de la probabilité de transition $w_{s\to f}$ on introduit le concept d'*amplitude de probabilité d'une transition* $\langle f \mid s \rangle$ *. En règle générale, c'est un nombre complexe dont le module au carré est égal à la probabilité de transition

$$w_{s\to f} = |\langle f \mid s\rangle|^2. \tag{8.1}$$

On notera que le symbole de l'amplitude de probabilité de transition comporte à droite le symbole de l'état initial et à gauche celui de l'état final (comme si on lisait de la droite vers la gauche). Dans ce qui suit, au lieu de dire « amplitude de probabilité de transition » nous dirons « amplitude de transition » (et même « amplitude » tout court).

En introduisant le concept d'amplitude de transition, qui joue en mécanique quantique un rôle extrêmement important, il convient d'exposer dans ce paragraphe, sous une forme générale, certains principes de base. Le lecteur ne doit pas être rebuté par le formalisme de cet exposé, étant donné que dans le paragraphe suivant nous illustrerons ces principes par des exemples concrets. Nous y étudierons notamment les liens existant entre ces principes et les expériences que nous avons décrites au § 7, ce qui nous permettra, d'une part, de donner un fondement à ces principes présentés de façon formelle et, d'autre part, d'interpréter les résultats étonnants de ces expériences.

---

* On trouvera dans les livres de Feynman [3-5] et de Dirac [9] des exposés de la mécanique quantique basés sur le concept d'amplitude de probabilité.

Principales règles de travail avec le concept d'amplitude. Nous allons définir les quatre principales règles de mise en œuvre du concept d'amplitude de transition. On doit considérer ces règles comme des postulats formant la base des conceptions de la mécanique quantique, qui sont confirmées par l'expérience.

Première règle. Supposons qu'il existe plusieurs modes (ou voies) de transition entre les états s et f d'une microparticule, qui sont *physiquement indiscernables* (fig. 8.1, *a*). Dans ces conditions l'amplitude de transition résultante $\langle f \mid s \rangle$ est égale à la *somme des amplitudes* caractérisant les différents modes de transitions:

$$\langle f \mid s \rangle = \sum_i \langle f \mid s \rangle_i \qquad (8.2)$$

(l'indice i désigne l'i-ème mode de transition).

Deuxième règle. Supposons (fig. 8.1, *b*) qu'il existe plusieurs états *finals* (f_1, f_2, f_3, . . ., f_i, . . .) et que l'on considère la probabilité de transition dans *l'un* de ces états. La probabilité de transition $|\langle f \mid s \rangle|^2$ est alors égale à la *somme des probabilités* de transition dans les différents états finals:

$$|\langle f \mid s \rangle|^2 = \sum_i |\langle f \mid s \rangle_i|^2. \qquad (8.3)$$

Troisième règle. Supposons (fig. 8.1, *c*) que la transition $s \to f$ s'effectue en passant par un *état intermédiaire* (état v). On aura alors à considérer les amplitudes des transitions consécutives $s \to v$ et $v \to f$ (donc les amplitudes $\langle v \mid s \rangle$ et $\langle f/v \rangle$). L'amplitude résultante est égale au produit des deux amplitudes ci-dessus:

$$\langle f \mid s \rangle = \langle f \mid v \rangle \langle v \mid s \rangle. \qquad (8.4)$$

Cela veut dire que dans le cas où une transition comporte plusieurs étapes consécutives, l'amplitude de la transition envisagée s'exprime par le produit des amplitudes de ses différentes étapes. On notera que l'expression (8.4) s'énonce en la lisant de droite à gauche, puisque alors les différents états consécutivement occupés seront énoncés dans l'ordre: état initial — état intermédiaire — état final.

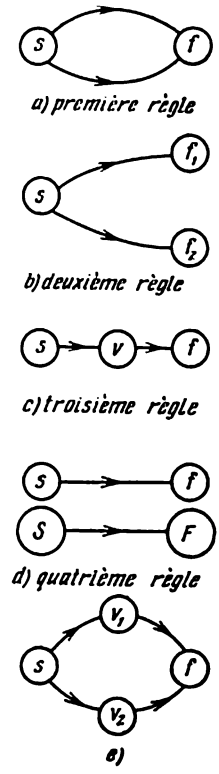


Fig. 8.1.

Quatrième règle. Supposons que nous ayons affaire à deux microparticules indépendantes (fig. 8.1, *d*); l'une d'elles effectue une transition $s \to f$ et l'autre effectue *simultanément* une transition $S \to F$. L'amplitude résultante de la transition de ce système de

microparticules s'exprime par le *produit* des amplitudes de transition des différentes microparticules :

$$\langle fF \mid sS \rangle = \langle f \mid s \rangle \langle F \mid S \rangle. \tag{8.5}$$

On notera que les deuxième, troisième et quatrième règles paraissent évidentes puisque, compte tenu de (8.1), elles expriment des théorèmes connus de la théorie de probabilité : le théorème d'addition (deuxième règle) et le théorème de multiplication des probabilités (troisième et quatrième règles). La première règle que l'on pourrait appeler *règle d'addition des amplitudes* paraît inusitée, mais c'est précisément cette règle qui joue un rôle essentiel dans l'élaboration de tout le système de conceptions de la mécanique quantique.

Alternatives discernables et indiscernables ; interférence des amplitudes. Considérons le cas où la transition d'un état initial à un état final ($s \to f$) s'effectue toujours par un des états intermédiaires ($v_1, v_2, \ldots, v_i, \ldots$) (fig. 8.1, *e*). Les différents modes de transition $s \to f$ (les différentes alternatives) sont caractérisés par la « participation » à cette transition de l'un des états intermédiaires.

Considérons deux cas distincts. Supposons que dans un premier cas l'*on sache* quel état intermédiaire a participé à la transition envisagée. C'est le cas dit d'*alternatives physiquement discernables*. On le décrit en combinant les deuxième et troisième règles. La probabilité de transition résultante est de la forme

$$|\langle f \mid s \rangle|^2 = \sum_i |\langle f \mid v_i \rangle \langle v_i \mid s \rangle|^2. \tag{8.6}$$

On peut se demander pourquoi on doit faire appel à la deuxième règle, puisqu'elle concerne des états *finals* différents. Or si on connaît l'état intermédiaire qui a été transitoirement occupé par la microparticule, on peut considérer cet état comme un état final par rapport à la première étape de la transition. Nous fixons la microparticule dans cet état, comme si nous suspendions provisoirement la poursuite de notre expérience. Une des microparticules sera considérée comme fixée dans un état intermédiaire, les autres dans d'autres états intermédiaires, ce qui correspond en fait à une situation caractérisée par des états finals différents. Remarquons bien que la *discernabilité des alternatives* est justement liée à l'existence d'*états finals différents* (même si dans une expérience donnée ils ne jouent que le rôle d'états intermédiaires).

Dans le second cas *nous ignorons* en passant par quel état intermédiaire s'est effectuée une transition donnée. C'est le cas d'*alternatives physiquement indiscernables*. Pour décrire ce cas, on combine la première et la troisième règles, et l'amplitude de transition résultante sera alors de la forme

$$\langle f \mid s \rangle = \sum_i \langle f \mid v_i \rangle \langle v_i \mid s \rangle. \tag{8.7}$$

Le résultat (8.7) est un résultat spécifiquement quantique et lorsqu'il s'avère valable on dit que l'on a affaire à une *interférence des amplitudes* de transition faisant intervenir des états intermédiaires différents. On remarquera que l'interférence des amplitudes n'est possible que dans le cas où les alternatives qui se présentent dans une expérience donnée sont physiquement indiscernables (la microparticule ne pouvant être décelée dans l'état intermédiaire, nous avons affaire à *un seul* état final).

En passant de l'amplitude de transition (8.7) à la probabilité de transition, on obtient

$$|\langle f \mid s\rangle|^2 = \Big|\sum_i \langle f \mid v_i\rangle \langle v_i \mid s\rangle^2. \qquad (8.8)$$

La comparaison des probabilités (8.6) et (8.8) fait bien apparaître la distinction entre les alternatives physiquement discernables et indiscernables. Dans le premier cas on additionne les probabilités des alternatives et dans le second on fait la somme des amplitudes de probabilité des alternatives.

Transitions auxquelles participent deux microparticules. Il est opportun de généraliser la quatrième règle relative aux transitions simultanées de deux microparticules. Supposons que l'une des particules effectue une transition $s \to f$ en passant par l'état intermédiaire v, et l'autre effectue une transition $S \to F$ en passant par l'état intermédiaire V (fig. 8.2, *a*). En combinant la troisième et la quatrième règles, nous pouvons écrire l'amplitude de transition du système de nos microparticules sous la forme suivante :

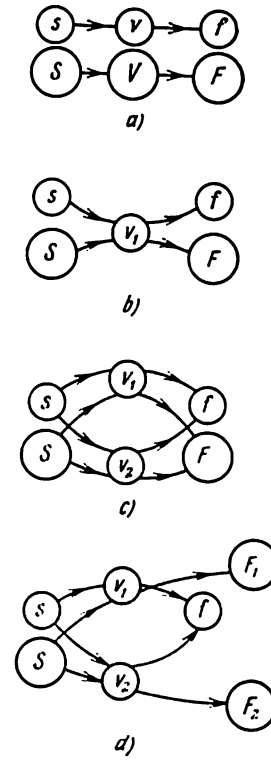


Fig. 8.2.

$$\langle fF \mid sS\rangle = \langle f \mid v\rangle \langle v \mid s\rangle \langle F \mid V\rangle \langle V \mid S\rangle. \qquad (8.9)$$

Supposons d'autre part que lors de leurs transitions les deux microparticules empruntent le même état intermédiaire v_1 (fig. 8.2, *b*). La formule (8.9) s'écrira alors de la manière suivante :

$$\langle fF \mid sS\rangle = \langle f \mid v_1\rangle \langle v_1 \mid s\rangle \langle F \mid v_1'\rangle \langle v_1 \mid S\rangle. \qquad (8.10)$$

Supposons enfin que chacune des microparticules réalise plusieurs alternatives physiquement indiscernables en empruntant plusieurs états intermédiaires distincts (v_1, v_2, . . ., v_i, . . .), chaque état intermédiaire étant simultanément occupé temporairement par

les deux microparticules (fig. 8.2, *c*). En généralisant la formule (8.10), compte tenu de la première règle, nous obtenons le résultat suivant

$$\langle fF \mid sS \rangle = \sum_i \langle f \mid v_i \rangle \langle v_i \mid s \rangle \langle F \langle v_i \langle v_i \mid \mid S \rangle. \qquad (8.11)$$

Anéantissement de l'interférence des amplitudes. L'interférence des amplitudes est anéantie dès que les alternatives deviennent discernables. Voyons comment cela se produit en considérant les transitions de deux microparticules [on utilisera le résultat (8.11)].

Désignons la microparticule effectuant la transition $s \to f$ sous le nom de particule s et celle qui effectue la transition $S \to F$ sous le nom de particule S. Supposons que nous n'utilisons la particule S que pour contrôler (« surveiller ») quel état intermédiaire emprunte dans chaque cas concret la particule s. Pour assurer un tel « contrôle », on doit introduire autant d'états finals F qu'il y a d'états intermédiaires v « contrôlés » (désignons-les par $F_1, F_2, \ldots, F_i, \ldots$) et s'arranger pour que la particule S passant, par exemple, par l'état v_i aboutisse à l'état F_i. Les différentes transitions sont représentées sur le schéma (8.2, *d*), où chaque état intermédiaire est pour ainsi dire « attaché » à un état final F bien déterminé. Il ne nous reste alors qu'à déterminer dans quel état final viendra se placer la particule S faisant fonction de « contrôleur ». Si en l'absence de particules S les différentes alternatives étaient indiscernables et que l'on ne pouvait savoir à quel état intermédiaire s'est effectuée la transition de la particule s, maintenant que nous utilisons des particules S, les alternatives deviennent physiquement discernables: l'état F dans lequel on trouve la particule S indique de façon univoque par quel état intermédiaire s'est effectuée la transition considérée. Conformément aux remarques qui ont été faites, la mise en œuvre de particules S pour distinguer les différents états intermédiaires entraîne l'anéantissement de l'interférence des amplitudes. Il nous reste à le démontrer.

Si dans l'état F_i ne vient se placer que la particule S qui est passée par l'état intermédiaire v_i, on doit avoir $\langle F_i \mid v_k \rangle = 0$ pour $k \neq i$. En utilisant (8.11), on en tire

$$\langle fF_i \mid sS \rangle = \langle f \mid v_i \rangle \langle v_i \mid s \rangle \langle F_i \mid v_i \rangle \langle v_i \mid S \rangle. \qquad (8.12)$$

Comme les états F_i sont des états finals différents, en appliquant la deuxième règle, on trouve que la probabilité de transition résultante de la particule s « contrôlée » est donnée par

$$|\langle f \mid s \rangle^2| = \sum_i |\langle fF_i \mid sS \rangle|^2 =$$

$$= \sum_i |\langle f \mid v_i \rangle \langle v_i \mid s \rangle \langle F_i \mid v_i \rangle \langle v_i \mid S \rangle|^2. \qquad (8.13)$$

Si on admet encore que pour tous les i l'amplitude $\langle F_i \mid S \rangle$ est la même (ce qui se produit souvent dans la pratique), en désignant

cette amplitude par a, l'expression (8.13) se laisse écrire de la façon suivante

$$|\langle f \mid s\rangle|^2 = |a|^2 \sum_i |\langle f \mid v_i\rangle\langle v_i \mid s\rangle|^2. \tag{8.14}$$

Cela montre que tandis qu'en l'absence de particules S (absence de « contrôle ») c'est la formule (8.8) qui était valable, maintenant que nous utilisons des particules S c'est la formule (8.14) qui l'est. Il est facile de se rendre compte que (8.14) correspond à (8.6), ce qui prouve que l'interférence des amplitudes se trouve anéantie dès que l'on se met à « contrôler » les états intermédiaires, ce qui signifie que l'on passe du cas d'alternatives physiquement indiscernables à celui d'alternatives discernables.

§ 9. Les amplitudes de probabilité des transitions (démonstration des principes généraux)

Comportement d'une microparticule dans l'interféromètre et interférence des amplitudes. Reprenons l'expérience n° 1 que nous avons décrite au § 7 et mettons en œuvre le concept d'amplitude de transition ainsi que les règles de travail avec ces amplitudes. L'électron émis à l'état s traverse l'écran par les fentes A et B auxquelles sont liés les états intermédiaires A et B et il est enfin enregistré dans un état final x, c'est-à-dire en un point de coordonnée x sur l'écran détecteur.

Supposons que la fente A est ouverte et la fente B obturée. On a alors $\langle x \mid s\rangle_A = \langle x \mid A\rangle\langle A \mid s\rangle$. La probabilité de transition $s \to x$, donc la probabilité de ce que l'électron sera détecté en un point x de l'écran détecteur, est de la forme

$$|\langle x \mid s\rangle_A|^2 = |\langle x \mid A\rangle\langle A \mid s\rangle|^2. \tag{9.1}$$

Désignons cette probabilité par $I_1(x)$; c'est en effet ainsi que nous avons désigné la répartition des impacts d'électrons sur l'écran détecteur obtenue dans l'expérience n° 1 du § 7 dans le cas où la fente A était ouverte et la fente B obturée. Dans le cas où c'est la fente A qui est obturée et la fente B ouverte, la probabilité de détection de l'électron en un point x s'exprime par une formule analogue

$$|\langle x \mid s\rangle_B|^2 = |\langle x \mid B\rangle\langle B \mid s\rangle|^2 = I_2(x). \tag{9.2}$$

Maintenons les deux fentes ouvertes. Puisqu'il est impossible d'indiquer par quelles fentes sont passés les différents électrons (les alternatives sont indiscernables), on écrira :

$$\langle x \mid s\rangle = \langle x \mid A\rangle\langle A \mid s\rangle + \langle x \mid B\rangle\langle B \mid s\rangle. \tag{9.3}$$

En désignant par $I(x)$ la probabilité de transition (c'est ainsi que nous avons désigné au § 7 la courbe d'interférence enregistrée lorsque

les deux fentes étaient ouvertes) et en tenant compte de (9.1) et (9.2), on obtient

$$I(x) = |\langle x|A\rangle\langle A|s\rangle + \langle x|B\rangle\langle B|s\rangle|^2 = \\ = I_1(x) + I_2(x) + \langle x|s\rangle_A \langle x|s\rangle_B^* + \langle x|s\rangle_A^* \langle x|s\rangle_B. \quad (9.4)$$

On voit aussitôt que la probabilité de transition résultante n'est pas égale à la somme des transitions par les fentes A et B $[I(x) \neq I_1(x) + I_2(x)]$; dans le second membre de (9.4) nous trouvons, en plus de $I_1(x)$ et $I_2(x)$, deux termes additionnels dont l'existence est déterminée par l'interférence des amplitudes. Ce sont ces termes qui sont responsables de la différence entre la courbe d'interférence $I(x)$ et la courbe $I_3(x) = I_1(x) + I_2(x)$.

Ces considérations démontrent bien que le caractère interférentiel de la répartition des impacts des électrons sur l'écran détecteur, lorsque les deux fentes sont ouvertes (expérience 1 du § 7), est la conséquence du résultat (9.4), donc la conséquence de l'interférence des amplitudes de deux transitions possibles de l'électron d'un état initial donné dans un état final également donné.

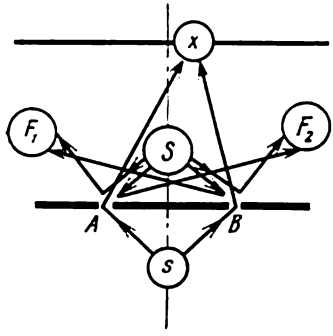


Fig. 9.1.

Destruction de l'interférence des amplitudes résultant du « contrôle » du comportement des microparticules dans l'interféromètre. La fig. 9.1 donne un schéma de l'expérience de principe n° 2 que nous avons décrite au § 7. s est la source d'électrons, S la source de photons, F_1 et F_2 des compteurs de photons fixant les deux états finals des photons diffusés par les électrons à proximité des fentes A et B. Nous supposerons d'abord que les photons diffusés à proximité de n'importe laquelle des deux fentes peuvent être indifféremment enregistrés à l'état F_1 ou à l'état F_2 (cela présuppose que l'on utilise un rayonnement d'une longueur d'onde suffisamment grande). Il est clair que dans ces conditions les photons ne peuvent « contrôler » le passage des électrons à travers les fentes de l'écran. Adoptons les notations suivantes des amplitudes de transition:

pour les électrons

$$\langle x \mid A\rangle\langle A \mid s\rangle = \varphi_1, \quad \langle x \mid B\rangle\langle B \mid s\rangle = \varphi_2, \quad (9.5)$$

et pour les photons (en tenant compte de la symétrie des transitions photoniques, illustrée par la fig. 9.1)

$$\begin{aligned} \langle F_1 \mid A\rangle\langle A \mid s\rangle &= \langle F_2 \mid B\rangle\langle B \mid S\rangle = \psi_1, \\ \langle F_2 \mid A\rangle\langle A \mid S\rangle &= \langle F_1 \mid B\rangle\langle B \mid S\rangle = \psi_2. \end{aligned} \quad (9.6)$$

En utilisant avec ces notations le résultat (8.11), nous pouvons écrire l'expression suivante pour l'amplitude de probabilité d'enregistrement simultané d'un électron en un point x du détecteur et du photon dans l'état F_1:

$$\langle xF_1 \mid sS \rangle = \varphi_1\psi_1 + \varphi_2\psi_2. \tag{9.7}$$

De même, l'amplitude de probabilité d'enregistrement simultané d'un électron en un point x et d'un photon dans l'état F_2 est donnée par

$$\langle xF_2 \mid sS \rangle \varphi_1\psi_2 + \varphi_2\psi_1. \tag{9.8}$$

La probabilité d'enregistrement d'un électron en un point x donné indépendamment du lieu d'enregistrement du photon est de la forme (en vertu de la deuxième règle du § 8):

$$| \langle x \mid s \rangle |^2 = | \langle xF_1 \mid sS \rangle |^2 + | \langle xF_2 \mid sS \rangle |^2. \tag{9.9}$$

En y substituant (9.7) et (9.8), nous avons

$$|\langle x \mid s\rangle|^2 = (|\varphi_1|^2 + |\varphi_2|^2)(|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2) + \\ + (\varphi_1\varphi_2^* + \varphi_1^*\varphi_2)(\psi_1\psi_2^* + \psi_1^*\psi_2). \tag{9.10}$$

Ainsi la probabilité résultante d'une transition électronique $s \to x$ est égale à la somme de deux termes. Le premier terme est égal au produit de $(|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2)$ par la somme des probabilités de traversées des fentes A et B considérées séparément. Le deuxième terme est du type interférentiel étant déterminé par l'interférence des amplitudes. C'est l'existence de ce second terme qui détermine la formation d'une répartition de type interférentiel des impacts électroniques sur l'écran détecteur.

Par conséquent, tant que les photons ne « contrôlent » pas le passage des électrons à travers les fentes de l'écran, on observe un effet d'interférence décrit par (9.10).

Rappelons que dans le cas considéré nous avons supposé que la longueur d'onde du rayonnement utilisé était suffusamment grande. Commençons maintenant à diminuer la longueur d'onde. Simultanément se trouvera diminuée la probabilité de ce que les photons diffusés par les électrons soient enregistrés par le compteur qui n'est pas le leur (par exemple, la probabilité de ce qu'un photon diffusé à proximité de la fente A soit enregistré par le compteur F_2). Cela signifie qu'à mesure que l'on diminue la longueur d'onde du rayonnement, l'amplitude ψ_2 doit diminuer. Or d'après (9.10), à mesure que l'amplitude ψ_2 diminue, la contribution relative du terme interférentiel diminue. De ce fait l'image d'interférence observée sur l'écran détecteur doit devenir de plus en plus floue.

Pour une longueur d'onde suffisamment courte il devient possible de « contrôler » avec précision le passage des électrons à travers les fentes de l'écran. Dans ce cas limite tout photon diffusé à proximité

de l'une des fentes ne peut être enregistré que par le compteur convenable. Cela signifie que $\psi_2 = 0$ et l'expression (9.10) devient alors

$$|\langle x|s\rangle|^2 = |\psi_1|^2 (|\varphi_1|^2 + |\varphi_2|^2). \tag{9.11}$$

Nous voyons que tout contrôle du passage des électrons à travers les fentes entraîne une destruction de l'interférence des amplitudes et donc la disparition de la répartition interférentielle des impacts des électrons sur l'écran détecteur. La formule (9.11) concorde parfaitement avec (8.14). Le « contrôle » rend discernables les alternatives correspondant au passage des électrons à travers les fentes.

L'étude de cet exemple montre que la question de discernabilité des alternatives n'est pas toute simple ; entre l'*indiscernabilité totale* et la *discernabilité parfaite* il existe tout un spectre de situations intermédiaires qui correspondent à une *discernabilité partielle*. La formule (9.11) caractérise le cas limite d'une discernabilité parfaite des alternatives en présence ($\psi_2 = 0$). Le cas limite opposé, celui de l'indiscernabilité totale des alternatives, suppose l'égalité des probabilités de ce qu'un photon soit enregistré par « son » compteur ou par l'autre compteur : $\psi_1 = \psi_2$. Il est facile de voir que (9.10) s'écrit dans ce cas de la manière suivante

$$|\langle x|s\rangle|^2 = 2|\psi_1|^2 |\varphi_1 + \varphi_2|^2. \tag{9.12}$$

L'expression (9.11) (résultant de l'addition des carrés des modules des amplitudes électroniques) et l'expression (9.12) (résultant de l'addition des amplitudes des électrons) sont des cas limites de l'expression (9.10). La formule (9.10), qui est la formule générale, caractérise les situations intermédiaires où les alternatives en présence sont partiellement discernables et se distinguent entre elles par la valeur du terme interférentiel. Plus ce terme est petit, meilleure est la discernabilité des alternatives.

On peut donc constater que la discernabilité et l'indiscernabilité des alternatives ne sont pas discrètes. On passe d'une indiscernabilité totale à une discernabilité parfaite par toute une gamme de situations *intermédiaires* caractérisées par une *discernabilité partielle*. Nous reprendrons cette question au § 10 en usant du principe de superposition *.

Diffusion des microparticules et interférence des amplitudes. Reprenons l'expérience n° 4 du § 7. Soient s_1 et s_2 les états initiaux des microparticules entrant en collision, et f_1 et f_2 leurs états finals fixés par des compteurs convenables. Au § 7 nous avons considéré la diffusion dans un angle de 90° dans un système de centres de masse des particules entrant en collision. Nous considérerons maintenant le cas général d'une diffusion dans un angle quelconque θ ; on dispose

* La question de la discernabilité partielle des alternatives est traitée en détail dans [31].

alors les compteurs le long d'une droite formant un angle θ avec la direction de propagation initiale des microparticules entrant en collision (toujours dans le système de leurs centres de masse (cf. fig. 9.2, *a*).

Si lors de la diffusion mutuelle l'une des microparticules effectue une transition $s_1 \to f_1$, et l'autre une transition $s_2 \to f_2$ (fig. 9.2, *b*), l'amplitude de diffusion sera de la forme

$$\varphi(\theta) = \langle f_1 \mid s_1 \rangle \langle f_2 \mid s_2 \rangle. \tag{9.13}$$

On peut envisager une autre alternative: l'une des microparticules effectue une transition $s_1 \to f_2$ et l'autre une transition $s_2 \to f_1$ (fig. 9.2, *c*). Dans ce dernier cas l'amplitude de diffusion sera

$$\varphi(\pi - \theta) = \langle f_2 \mid s_1 \rangle \langle f_1 \mid s_2 \rangle. \tag{9.14}$$

Supposons que les microparticules sont *parfaitement discernables*. Ce serait par exemple le cas où les particules sont d'espèces diffé-

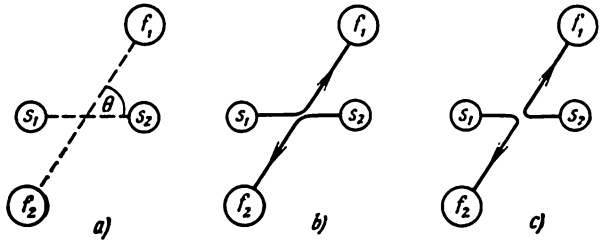


Fig. 9.2.

rentes ou encore, bien qu'étant de même espèce, les particules ont des états de spin différents. Considérons d'abord le cas où le compteur f_1 n'enregistre que les particules issues de s_1, et le compteur f_2 que les particules issues de s_2 (c'est la situation considérée dans le premier exemple cité dans l'expérience n° 4 du § 7). La probabilité d'un déclenchement simultané des deux compteurs est alors égale à:

$$|\varphi(\theta)|^2 = |\langle f_1 \mid s_1 \rangle \langle f_2 \mid s_2 \rangle|^2. \tag{9.15}$$

Considérons maintenant une situation différente: chacun des compteurs peut enregistrer n'importe laquelle des microparticules entrant en collision (c'est le deuxième exemple cité dans l'expérience n° 4 du § 7). On devra maintenant tenir compte de deux alternatives. Dans le cas où les microparticules sont parfaitement discernables, les alternatives qui s'offrent dans le cas que nous considérons sont, elles, aussi parfaitement discernables, et la probabilité d'un déclenchement simultané des deux compteurs sera égale à:

$$|\varphi(\theta)|^2 + |\varphi(\pi - \theta)|^2 = |\langle f_1 \mid s_1 \rangle \langle f_2 \mid s_2 \rangle|^2 + \\ + |\langle f_2 \mid s_1 \rangle \langle f_1 \mid s_2 \rangle|^2. \tag{9.16}$$

En posant $\theta = \pi/2$, la probabilité devient égale à $2 \mid \varphi(\pi/2) \mid^2$, et c'est précisément de cette probabilité double qu'il s'agissait dans le deuxième de l'expérience n° 4 du § 7.

Supposons maintenant que les microparticules sont *totalement indiscernables*. Cela signifie que nous avons affaire à des particules de même espèce se trouvant dans des états identiques. L'identité des microparticules dont il a été question au § 6 est une condition *nécessaire* pour qu'elles soient totalement indiscernables.

Si les microparticules sont totalement indiscernables, les alternatives illustrées par les fig. 9.2, *b* et *c* le sont aussi. On devra alors faire la somme non plus des probabilités des alternatives, mais de leurs amplitudes; la probabilité du déclenchement simultané des deux compteurs est donnée par

$$w = \mid \varphi(\theta) + \varphi(\pi - \theta) \mid^2. \tag{9.17}$$

L'application de (9.17) au troisième exemple cité dans l'expérience n° 4 du § 7 (diffusion mutuelle de particules α) conduit au résultat suivant:

$$w = \mid \varphi(\pi/2) + \varphi(\pi/2) \mid^2 = 4 \mid \varphi(\pi/2) \mid^2. \tag{9.18}$$

C'est précisément cette valeur-là que fournit l'expérience.

L'interférence des amplitudes de diffusion n'est qu'une des conséquences de l'indiscernabilité des microparticules. Une autre conséquence en est que la probabilité w du déclenchement simultané des compteurs ne doit pas changer si on intervertit s_1 et s_2, ce qui revient à intervertir les amplitudes de diffusion $\varphi(\theta)$ et $\varphi(\pi - \theta)$. Tenant compte de ces conséquences de l'indiscernabilité des particules, la probabilité w se laisse tout formellement exprimer par

$$w = \mid \varphi(\theta) \pm \varphi(\pi - \theta) \mid^2. \tag{9.19}$$

La variante correspondant au signe « + » (les amplitudes qui interfèrent sont de *même signe*) est l'expression (9.17). Tout formellement on peut envisager l'autre variante, où les amplitudes qui interfèrent sont de signes *contraires*. Il est remarquable que la Nature « utilise » également cette deuxième variante; pour s'en rendre compte il suffit de considérer les résultats expérimentaux de la diffusion mutuelle des électrons.

Supposons donc que les amplitudes qui interfèrent sont de *signes contraires*:

$$w_e = \mid \varphi(\theta) - \varphi(\pi - \theta) \mid^2 \tag{9.20}$$

et reprenons les résultats des expériences dont il a été question ci-dessus. Lorsque $\theta = \pi/2$, la probabilité (9.20) devient nulle, ce qui correspond précisément au sixième exemple considéré dans l'expérience n° 4 du § 7. Rappelons qu'il s'agissait de la collision d'électrons se trouvant dans un seul et même état de spin. C'est le cas

où on trouve pour les électrons deux alternatives totalement indiscernables *.

Dans le cas où les électrons qui entrent en collision se trouvent dans des états de spin différents (cinquième exemple de l'expérience n° 4), les alternatives sont discernables; la probabilité de déclenchement des compteurs est alors donnée par l'expression (9.17), convenant au cas de particules discernables; lorsque $\theta = \pi/2$ on retrouve le résultat déjà connu: $2\,|\,\varphi\,(\pi/\,\theta)\,|^2$. Pour des faisceaux électroniques non polarisés (quatrième exemple de l'expérience n° 4), on tiendra compte de ce que la probabilité de collision de deux électrons se trouvant dans le même état de spin vaut 1/2; en utilisant (9.20) et (9.16), on trouve alors la probabilité suivante de déclenchement des compteurs:

$$w_e = \frac{1}{2}\,|\,\varphi(\theta) - \varphi(\pi-\theta)\,|^2 + \frac{1}{2}\,[|\,\varphi(\theta)\,|^2 + |\varphi(\pi-\theta)\,|^2]. \quad (9.21)$$

On trouve dans cette expression aussi bien une somme d'amplitudes (pour le cas d'alternatives indiscernables) qu'une somme de probabilités (pour le cas d'alternatives discernables). Lorsque $\theta = \pi/2$, on tire de (9.21) une probabilité $w_e = |\,\varphi\,(\pi/2)\,|^2$. C'est la valeur moitié de la « probabilité classique » (de la probabilité qui apparaît lorsque les alternatives sont indiscernables); ce résultat est conforme aux données expérimentales citées au § 7.

Interférence des amplitudes et classement des microparticules en bosons et en fermions. Nous venons de nous assurer que les expériences concernant la diffusion des microparticules qui avaient été décrites au § 7 justifient pleinement le concept d'interférence des amplitudes. En outre, elles démontrent qu'il est indispensable d'utiliser non pas une mais *deux* règles d'interférence décrites par les expressions (9.17) et (9.20). Analysons la signification de ces deux règles en posant $\theta = \pi/2$. D'après (9.17) on a pour le cas de particules α:

$$w = 4\,|\,\varphi\,(\pi/2)\,|^2, \quad (9.22)$$

et d'après (9.17) on a pour des électrons se trouvant dans un seul et même état de spin

$$w_e = 0. \quad (9.23)$$

L'utilisation d'un angle de diffusion $\theta = \pi/2$ rend symétrique le schéma du processus de diffusion. Si on remarque d'autre part que les électrons se trouvent dans le cas considéré dans un seul et même état de spin (les particules α n'ont pas de spin), on arrive à la conclusion que les expressions (9.22) et (9.23) définissent les probabilités

* Dans ce qui suit nous omettrons de préciser que l'indiscernabilité est totale chaque fois qu'il s'agira d'alternatives discernables et indiscernables. Mais on indiquera expressément les cas où la discernabilité ne sera que partielle.

d'occurrence dans un même état respectivement d'une paire de particules α ou d'une paire d'électrons. En comparant ces probabilités à la « probabilité classique » $2\,|\varphi\,(\pi/2)|^2$, on arrive à conclure qu'une espèce de microparticules (les particules α) ont tendance à peupler fortement un seul et même état, tandis que les microparticules de l'autre espèce (les électrons) ne peuvent occuper les états disponibles qu'isolément (chaque état est occupé par une seule microparticule).

Nous avons déjà mentionné au § 7 que toutes les particules existant dans la nature se laissent classer d'après leur comportement au sein des collectivités de particules de même espèce en deux groupes, le groupe des *bosons* (qui cherchent à peupler au maximum un seul et même état) et le groupe des *fermions* (chaque état ne peut être occupé que par une seule particule). Ce *fait fondamental* est intimement lié à l'existence de *deux règles différentes d'interférence des amplitudes.* Dans le cas de bosons l'interférence a lieu pour des amplitudes de même signe, et dans celui de fermions l'interférence se produit entre des amplitudes de signes contraires.

Caractère bosonique des photons et les processus d'émission spontanée et induite de la lumière. Considérons l'exemple suivant : soient trois atomes (s_1, s_2, s_3) émettant des photons et trois compteurs de photons (f_1, f_2, f_3). L'amplitude de probabilité de trois transitions simultanées ($s_1 \to f_1$, $s_2 \to f_2$, $s_3 \to f_3$) est : $\langle f_1 \mid s_1 \rangle \langle f_2 \mid s_2 \rangle \langle f_3 \mid s_3 \rangle$. Supposons que les photons sont enregistrés tous dans un seul et même état. Nous avons alors $3! = 6$ alternatives indiscernables auxquelles correspondent, en plus de l'amplitude mentionnée ci-dessus, encore cinq autres amplitudes :

$$\langle f_1 \mid s_2 \rangle \langle f_2 \mid s_1 \rangle \langle f_3 \mid s_3 \rangle,$$
$$\langle f_1 \mid s_1 \rangle \langle f_3 \mid s_2 \rangle \langle f_2 \mid s_3 \rangle,$$
$$\langle f_3 \mid s_1 \rangle \langle f_2 \mid s_2 \rangle \langle f_1 \mid s_3 \rangle,$$
$$\langle f_1 \mid s_2 \rangle \langle f_2 \mid s_3 \rangle \langle f_3 \mid s_1 \rangle,$$
$$\langle f_1 \mid s_3 \rangle \langle f_2 \mid s_1 \rangle \langle f_3 \mid s_2 \rangle.$$

En admettant que l'amplitude de toutes les transitions $s_i \to f_k$ est la même (nous la désignerons par a) et tenant compte de ce que les alternatives sont indiscernables, nous trouvons que l'amplitude de transition s'accompagnant de l'émission de trois photons est égale à $3!a^3$ et la probabilité correspondante est égale à $(3!)^2 \mid a^3 \mid^2$. Si les alternatives étaient discernables (si les microparticules émises étaient discernables), la probabilité serait égale à $3!\ |a^3|^2$. En généralisant ce résultat au cas de n microparticules, nous trouvons respectivement $(n!)^2 \mid a^n \mid^2$ et $n! \mid a^n \mid^2$.

Soit w_n la probabilité d'émission de n bosons (dans le cas considéré de n photons) se trouvant dans un seul et même état, et soit W_n la probabilité d'émission de n microparticules discernables se trou-

vant dans un seul et même état. Il est facile de se rendre compte que l'on a

$$w_n = n!W_n. \tag{9.24}$$

Cela signifie que la probabilité d'enregistrement simultané de n bosons est $n!$ fois plus grande que la probabilité d'enregistrement simultané de n particules discernables. Transcrivons (9.24) en remplaçant n par $n+1$:

$$w_{n+1} = (n+1)!\, W_{n+1}. \tag{9.25}$$

En divisant (9.25) par (9.24), nous obtenons :

$$w_{n+1}/w_n = (n+1)\, W_{n+1}/W_n. \tag{9.26}$$

Ce dernier résultat signifie que la probabilité de placer encore un boson dans un état où il y a déjà n bosons est $n+1$ fois plus grande que la probabilité de placer encore une microparticule discernable dans un état déjà occupé par n autres particules discernables. Notons que pour les microparticules discernables l'existence d'une population préexistante ne joue aucun rôle. L'application de cette remarque aux bosons correspond au cas où un boson vient occuper un état vacant ; aussi peut-on interpréter le résultat (9.26) de la façon suivante : la probabilité de voir apparaître encore un boson dans un état où il y en a déjà n est $n+1$ fois plus grande que la probabilité de voir apparaître un boson dans un état vacant. On peut, par conséquent, transcrire (9.26) sous la forme

$$|\langle n+1 \mid n\rangle|^2 = (n+1)|\langle 1 \mid 0\rangle|^2. \tag{9.27}$$

Dans cette formule on considère un état déterminé ; l'état $\langle 1 \mid 0\rangle$ correspond à l'amplitude de la transition :

(état vacant) $\rightarrow$ (état occupé par un boson), tandis que l'état $\langle n+1 \mid n\rangle$ correspond à l'amplitude de la transition :

(état occupé par n bosons) $\rightarrow$ (état occupé par $n+1$ bosons). Rapporté aux amplitudes et non aux probabilités, le résultat (9.27) signifie que

$$\langle n+1 \mid n\rangle = \sqrt{n+1}\, \langle 1 \mid 0\rangle. \tag{9.28}$$

Appliquons la formule (9.27) à l'étude du processus d'émission de photons (émission de lumière). On constate aisément que la probabilité d'émission comporte deux termes additifs

$$|\langle n+1 \mid s\rangle|^2_s = |\langle 1 \mid 0\rangle|^2, \tag{9.29}$$

$$|\langle n+1 \mid n\rangle|^2_i = n\,|\langle 1 \mid 0\rangle|^2. \tag{9.30}$$

(9.29) décrit la probabilité de l'émission *spontanée* et (9.30) la probabilité de l'*émission induite de la lumière*. Dans le cas de l'émission spontanée, dans les atomes-émetteurs constituant la matière se ma-

nifestent des transitions spontanées ; il n'y a aucune corrélation entre les différentes transitions et celles-ci sont indépendantes du rayonnement extérieur. L'émission induite dépend, par contre, de la présence de photons à proximité des atomes émetteurs, et plus il y a de photons, plus grande est la probabilité de l'émission induite. Tout se passe comme si du fait de leur caractère bosonique les photons « extirpaient » de la matière d'autres photons ou, plus exactement, les photons stimulent les transitions s'accompagnant de l'émission de nouveaux photons. On doit remarquer expressément que le photon « stimulé » apparaît dans *le même* état que l'état du photon « stimulateur ».

Absorption de la lumière et corrélation entre les amplitudes des transitions dans les sens direct et inverse.

L'expérience montre que l'absorption de la lumière par la matière est d'autant plus grande que le nombre de photons présents dans le rayonnement incident est grand. En ce sens l'absorption de la lumière est un processus induit. Par analogie avec (9.30), on peut écrire l'expression suivante pour la probabilité d'annihilation d'un photon parmi n photons de même état : $|\langle n-1 \mid n\rangle|^2 = n \mid \langle 0 \mid 1\rangle|^2$. Ecrivons la même expression en remplaçant n par $n+1$:

$$|\langle n \mid n+1\rangle|^2 = (n+1)|\langle 0 \mid 1\rangle|^2. \tag{9.31}$$

En comparant (9.31) à (9.27), on voit que les probabilités de transition dans les sens direct et inverse sont égales : $|\langle n+1 \mid n\rangle|^2 = |\langle n \mid n+1\rangle|^2$.

En considérant un cas concret, nous avons démontré ainsi le *principe de la réversibilité microscopique* :

$$|\langle f \mid s\rangle|^2 = |\langle s \mid f\rangle|^2. \tag{9.32}$$

En appliquant ce principe aux amplitudes de transition, on a

$$\langle f \mid s\rangle = \langle s \mid f\rangle^*. \tag{9.33}$$

Cette dernière égalité vient s'ajouter aux quatre règles de travail avec les amplitudes de transition que nous avons établies au § 8 ; l'égalité (9.33) peut être considérée comme la cinquième règle.

Autres exemples. Nous allons considérer deux exemples illustrant le concept d'amplitude.

Diffusion des neutrons par un cristal. Nous allons considérer la diffusion de neutrons lents (d'une énergie inférieure ou égale à 0,1 eV) par des noyaux atomiques. On sait que pour des énergies aussi faibles l'amplitude de diffusion φ rapportée à un système de centres de masses est indépendante de l'angle de diffusion. On pourrait penser que dans ces conditions la probabilité de diffusion devrait être, elle aussi, isotrope. Cependant les données expérimentales de la diffusion de neutrons de très faibles énergies par les cristaux révèlent une forte dépendance angulaire de la probabilité de diffusion ; une

courbe typique est représentée fig. 9.3 : sur un fond évoluant de façon monotone, on voit apparaître des pics. L'existence de ces pics témoigne de l'effet d'interférence des amplitudes. Il nous reste à démontrer qu'il en est bien ainsi.

Supposons que les neutrons se trouvant dans un état initial s sont enregistrés dans un état final f. L'état intermédiaire i correspond à l'i-ème noyau atomique du réseau cristallin du corps diffusant. D'après la 3-ième règle du § 8 nous avons

$$\langle f \mid s \rangle_i = \langle f \mid i \rangle \varphi \langle i \mid s \rangle. \qquad (9.34)$$

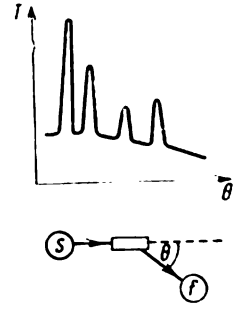


Fig. 9.3.

Supposons que tous les N noyaux constituant le cristal sont identiques, sont dépourvus de spin et sont strictement localisés dans les nœuds du réseau cristallin. Il est alors par principe impossible d'indiquer sur quel noyau s'est produite la diffusion d'un neutron incident, ce que l'on peut exprimer en disant que les alternatives de diffusion par des noyaux de différents numéros d'ordre sont indiscernables. Par suite on doit tenir compte de l'interférence des amplitudes :

$$\langle f \mid s \rangle = \sum_i^N \langle f \mid s \rangle_i = \sum_i^N \langle f \mid i \rangle \varphi \langle i \mid s \rangle. \qquad (9.35)$$

Avec (9.35) la probabilité de diffusion d'un neutron est de la forme :

$$| \langle f \mid s \rangle |^2 = | \varphi |^2 \left| \sum_i^N \langle f \mid i \rangle \langle i \mid s \rangle \right|^2. \qquad (9.36)$$

Comme les amplitudes de diffusion par les noyaux s'additionnent et comme les noyaux sont répartis d'une manière bien déterminée dans l'espace, il peut se produire que dans certaines directions se manifeste une « extinction » mutuelle des amplitudes et dans d'autres leur renforcement mutuel ; c'est cet effet d'interférence qui se traduit par l'existence de pics aigus pour des angles de diffusion bien déterminés.

Supposons maintenant que les noyaux constituant le cristal possèdent un spin (posons que ce spin soit égal à 1/2, comme celui des neutrons). On devra alors distinguer les amplitudes de diffusion par les noyaux *s'accompagnant d'un renversement du spin* des noyaux (en vertu du principe de conservation du moment, le spin du neutron doit lui aussi changer d'orientation) et celles qui *ne s'accompagnent pas d'un renversement du spin* des noyaux et des neutrons ; désignons-les respectivement par χ et φ. Dans le cas où la diffusion s'accompagne d'un renversement des spins des microparticules entrant en collision, l'alternative correspondante est discernable puisque alors la diffusion s'est produite sur le noyau dont le spin a changé

de sens. Maintenant on doit additionner non pas les amplitudes, mais les probabilités elles-mêmes.

Tenant compte des amplitudes χ et φ, nous pouvons représenter la probabilité de diffusion d'un neutron d'un état initial s à un état final f par l'expression suivante

$$|\langle f|s\rangle|^2 = |\varphi|^2 \left|\sum_i^N \langle f|i\rangle\langle i|s\rangle\right|^2 + |\chi|^2 \sum_i^N |\langle f|i\rangle\langle i|s\rangle|^2. \quad (9.37)$$

Le premier terme du second membre de (9.37) détermine l'apparition des pics d'interférence que l'on voit sur la fig. 9.3, tandis que le second terme décrit le fond évoluant de façon monotone. Il est devenu usuel d'exprimer ces résultats en disant que le premier terme caractérise la probabilité d'une diffusion *cohérente* des neutrons et le second terme une diffusion *non cohérente*.

Comportement d'un jet d'atomes dans des champs non homogènes. Supposons qu'un jet d'atomes se trouvant initialement dans un état s bien déterminé (c'est donc un état de spin bien déterminé) traverse d'abord une première région où règne un champ magnétique non homogène (B_1), puis une deuxième région de champ non homogène (B_2), après quoi les atomes sont enregistrés dans un état de spin final f. On utilise des champs magnétiques non homogènes, puisqu'ils sont susceptibles de modifier l'état de spin des atomes du jet. L'expérience montre que la probabilité de la transition $s \to f$ est différente selon que l'on se place dans l'un ou l'autre des cas suivants : *a*) cas de l'observation ayant pour objet de déterminer l'état des atomes du jet dans la région comprise entre les champs inhomogènes B_1 et B_2 ; *b*) cas où il n'y a pas d'observation. La différence que l'on constate entre les probabilités $|\langle f|s\rangle|^2$ correspondant à ces deux cas s'interprète sans difficultés si on remarque que dans le cas *a* les états de spin i intermédiaires sont constamment fixés et que de ce fait les alternatives correspondantes sont discernables ; ce qui entraîne que

$$|\langle f|s\rangle|^2 = \sum_i |\langle f|i\rangle\langle i|s\rangle|^2. \quad (9.38)$$

Dans le cas *b* les états i intermédiaires ne sont pas fixés et les alternatives correspondantes ne sont donc pas discernables, ce qui entraîne que

$$|\langle f|s\rangle|^2 = \left|\sum_i \langle f|i\rangle\langle i|s\rangle\right|^2. \quad (9.39)$$

Les intégrales le long des trajectoires de Feynman. Indiquons pour conclure la possibilité de formuler la mécanique quantique en s'appuyant sur le concept d'amplitude. Au début de ce paragraphe nous avons considéré un interféromètre constitué par un écran comportant deux fentes ; on se trouvait en présence de deux alternatives indiscernables auxquelles correspondaient deux amplitudes interférant entre elles. Supposons maintenant qu'au lieu d'utiliser un écran

à deux fentes, on utilise un écran à n fentes; le nombre d'alternatives (et donc le nombre d'amplitudes) deviendra alors égal à n. Plaçons maintenant parallèlement à cet écran un deuxième écran comportant, lui aussi, n fentes; le nombre d'alternatives (et d'amplitudes) deviendra égal à n^2. Continuons d'ajouter de nouveaux écrans en remplissant progressivement tout l'espace compris entre la source de microparticules et l'écran détecteur; ce faisant, nous augmenterons le nombre de fentes dans chaque nouvel écran ajouté. A la limite, lorsque le nombre d'écrans et le nombre de fentes qu'ils comportent deviendront infiniment grands, nous aboutissons à une situation où tout l'espace compris entre la source et le détecteur de microparticules sera « rempli » par toutes les « trajectoires » possibles des microparticules; à chacune de ces « trajectoires » correspondent une certaine alternative et une certaine amplitude (la fig. 9.4, *a* aide à se faire une idée de l'allure de ces trajectoires). L'ampliude totale de la transition $s \to x$ est égale à la somme (ou plus exactement à l'intégrale) de toutes les amplitudes envisageables. Supposons maintenant que la mise en place de tous ces écrans a été une opération mentale, et qu'en réalité il n'y a aucun écran, mais que tout l'espace entre les points s et x est « rempli » de trajectoires les plus diverses. Si nous arrivons à faire correspondre à chacune de ces trajectoires une amplitude de transition, la probabilité de la transition $s \to x$ sera égale au carré du module de l'intégrale de toutes les amplitudes (on dit que c'est une intégrale le long des trajectoires). En ce sens le mouvement quanto-mécanique de s en x n'est rien d'autre qu'une superposition d'une multitude de mouvements classiques (de trajectoires classiques, dans le genre de celles représentées fig. 9.4, *b*). Le passage de la mécanique quantique à la mécanique classique correspond à la superposition de ces différentes trajectoires et l'obtention d'une seule trajectoire.

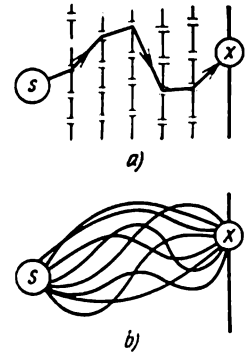


Fig. 9.4.

On se reportera à [5] pour une étude détaillée de la représentation du mouvement des microparticules par des intégrales le long des trajectoires classiques (ce qui correspond à l'interférence des amplitudes correspondant à ces trajectoires classiques).

§ 10. Le principe de superposition des états

Dans les paragraphes précédents consacrés aux probabilités de transition entre états nous avons introduit et caractérisé les concepts d'amplitude de probabilité de transition des alternatives discernables et indiscernables des transitions quantiques, et de l'interférence des amplitudes se manifestant dans le cas d'alternatives indiscernables; toutes ces questions sont spécifiques de la mécanique quantique. Les différents exemples que nous avons donnés pour illustrer ces concepts ont sûrement permis au lecteur de se rendre compte de l'importance de l'idée de l'interférence des amplitudes, puisque celle-ci permet d'interpréter de nombreux résultats expérimentaux concernant le comportement des microparticules.

L'interférence des amplitudes de transition est intimement liée à l'un des principes parmi les plus fondamentaux de la mécanique

quantique, *le principe de la superposition des états*, qui reflète toute la spécificité des « relations mutuelles » des états d'une microparticule. Passons maintenant à l'énoncé et à l'étude de ce principe.

Le principe de superposition des états. Nous avons déjà procédé au § 3 à une étude des relations d'incertitude. Nous avons alors indiqué que les états des microparticules se laissent répartir en plusieurs groupes; chaque groupe est caractérisé par un ensemble complet de grandeurs physiques. Nous y avons donné des exemples d'ensembles complets de grandeurs pour l'électron et le photon.

En reprenant ce même sujet abordé au § 3, nous commencerons par introduire des notations pour les différents ensembles complets: ensemble α, ensemble β, ensemble γ, etc. On pourra alors parler de groupes d'états α, d'états β, d'états γ, etc. Supposons qu'une microparticule se trouve dans l'un des états α. Cela sous-entend que les grandeurs de l'ensemble α ont des valeurs déterminées. Et que savons-nous des valeurs qu'assument alors les grandeurs d'un autre ensemble complet, l'ensemble β par exemple? Selon les relations d'incertitude, les grandeurs appartenant à l'ensemble β ne possèdent pas de valeurs déterminées dans l'état considéré. Le lecteur sera enclin à considérer que cet état de choses est regrettable. Heureusement cet aspect négatif de la question se trouve compensé par un aspect positif qui se résume dans le principe de superposition des états.

Conformément à ce principe, il existe un *lien* entre les états d'une microparticule correspondant à des ensembles complets *différents*: tout état d'un ensemble donné peut être représenté sous forme d'une *superposition d'états* appartenant à un autre ensemble complet. Ainsi, par exemple, un état α donné peut être représenté par une superposition d'états de l'ensemble β. Convenons d'utiliser pour la désignation de l'état d'une microparticule le symbole $\langle|$. On peut alors exprimer le principe de la superposition d'états sous la forme:

$$\langle\alpha| = \sum_{\beta} \Phi_{\alpha\beta} \langle\beta|. \tag{10.1}$$

L'expression (10.1) apparaît comme un développement de l'état donné $\langle\alpha|$ suivant tous les états β, les nombres $\Phi_{\alpha\beta}$ jouant le rôle de coefficients du développement. Pour être concret, disons que le nombre $\Phi_{\alpha\beta}$ représente l'amplitude de la probabilité de ce que lors de la mesure des grandeurs de l'ensemble β d'une microparticule se trouvant dans l'état $\langle\alpha|$ on obtient des valeurs correspondant à l'état $\langle\beta|$. Autrement dit, c'est l'amplitude de la probabilité de ce qu'une microparticule se trouvant dans l'état $\langle\alpha|$ peut être également décelée dans un état $\langle\beta|$. Désignons cette amplitude par le symbole usuel $\langle\alpha|\beta\rangle$; l'expression (10.1) peut s'écrire alors

$$\langle\alpha| = \sum_{\beta} \langle\alpha|\beta\rangle \langle\beta|. \tag{10.2}$$

Dans les paragraphes précédents nous avons considéré les amplitudes de probabilité de transition (en abrégé: amplitudes de tran-

sition). Il pourrait sembler à première vue que le principe de superposition fait intervenir un nouveau type d'amplitudes de transition. En effet nous avons écrit ci-dessus que « $\langle\alpha \mid \beta\rangle$ représente l'amplitude de la probabilité de ce qu'une microparticule se trouvant dans l'état $\langle\alpha \mid$ peut être également décelée dans un état $\langle\beta \mid$ ». Cette proposition peut être paraphrasée de la manière suivante : « $\langle\alpha \mid \beta\rangle$ est l'amplitude de la probabilité d'existence de la microparticule dans l'état $\langle\beta \mid$, tout en sachant avec certitude que cette microparticule se trouve dans l'état $\langle\alpha \mid$ ». Autrement dit, cela signifie que $\langle\alpha \mid \beta\rangle$ est l'amplitude de la probabilité de représentation d'un état β dans un état α donné. Il semble que l'amplitude $\langle\alpha \mid \beta\rangle$ n'ait aucun rapport à aucune transition et à aucun processus. Aussi est-il tout indiqué d'introduire une nouvelle dénomination pour le symbole $\langle\alpha \mid \beta\rangle$; nous l'appellerons *amplitude de probabilité d'état* (en bref, *amplitude d'état*).

Disons-le tout net, l'impression que produisent sur le lecteur les énoncés ci-dessus est fausse. Mais pour s'en rendre compte il faut procéder à une analyse de l'acte de mesure. La question de mesure en mécanique quantique sera débattue au § 11, et on pourra alors apporter des rectifications à la définition de l'amplitude $\langle\alpha \mid \beta\rangle$ donnée ci-dessus et ramener le concept d'*amplitude d'état* à celui d'*amplitude de transition* que le lecteur connaît déjà.

Mais pour le moment nous continuerons d'utiliser l'expression « amplitude d'état » comme si c'était un concept indépendant, et sans préciser la signification d'un énoncé tel que : « une microparticule se trouvant dans un état $\langle\alpha \mid$ peut être également décelée dans l'état $\langle\beta \mid$ ».

Nous avons déjà mentionné que le principe de superposition complète pour ainsi dire les relations d'incertitude ; son contenu positif compense en un certain sens les aspects négatifs de ces relations. On serait tenté de dire que les relations d'incertitude mettent en relief les « vieilles idées » qu'il faut rejeter lorsqu'on passe de l'étude des macrophénomènes à celle des microphénomènes ; elles imposent notamment de répudier l'idée de la possibilité de mesure simultanée de toutes les grandeurs physiques caractérisant l'objet de l'étude. Quant au principe de superposition, il met en relief les « idées nouvelles » que l'on doit mettre en œuvre pour l'étude des microphénomènes ; la superposition (10.2) signifie que si la microparticule se trouve dans un état dont on peut mesurer les grandeurs de l'ensemble α, on peut prévoir, sur une *base de probabilité*, les valeurs des grandeurs d'un ensemble β ; la probabilité correspondante est égale à $|\langle\alpha \mid \beta\rangle|^2$.

Les superpositions en physique classique et en mécanique quantique. En physique classique la superposition se rencontre assez fréquemment ; un premier exemple en est fourni par la superposition des ondes classiques. Du point de vue de la formulation mathématique,

la superposition quantique est analogue à la superposition classique. C'est justement cette analogie qui a stimulé dans une assez large mesure l'élaboration de la théorie quantique. Mais cette même analogie rendait plus difficile la pénétration du contenu physique des résultats de la théorie, puisqu'elle induisait en tentation d'établir des analogies inadéquates avec les ondes classiques. Dirac écrivait à ce propos [9], « *le fait d'admettre l'existence de corrélations de superposition entre les états conduit à l'établissement d'une théorie mathématique dans laquelle les équations de mouvement décrivant les états sont linéaires par rapport aux inconnues. C'est ce qui a incité de nombreux chercheurs à établir des analogies avec des systèmes mécaniques tels les cordes et les membranes vibrantes qui, se conformant à des équations linéaires, se conforment donc au principe de superposition* (rappelons à ce propos nos remarques critiques du § 5 relatives aux tentatives de décrire le mouvement d'une microparticule liée à l'aide d'une onde classique se propageant dans un résonateur ad hoc. *Note de l'auteur*). *Il ne faut cependant pas perdre de vue que les superpositions auxquelles on a affaire en mécanique quantique diffèrent essentiellement des superpositions que l'on rencontre dans toute théorie classique. On s'en rend compte en remarquant que le principe de superposition quantique est intimement lié à l'indétermination des résultats de mesure* ».

Pour mieux faire ressortir la différence entre la superposition classique et la superposition quantique, on remarquera que la superposition de deux ondes classiques conduit à l'apparition d'une nouvelle onde présentant naturellement de nouvelles caractéristiques. Par contre, le cas de la superposition de deux états $\langle\beta_1|$ et $\langle\beta_2|$, caractérisés chacun par les valeurs β_1 et β_2 des grandeurs de l'ensemble β, ne conduit nullement à l'apparition d'un état caractérisé par une nouvelle valeur de β. Considérons à titre d'exemple un état de superposition tel que

$$\langle\alpha|\beta_1\rangle\langle\beta_1| + \langle\alpha|\beta_2\rangle\langle\beta_2|.$$

Mesurons la grandeur β dans cet état-là. Les mesures nous donneront chaque fois l'une des valeurs β_1 ou β_2 que l'on connaissait déjà. On ne peut prédéterminer avec précision laquelle de ces deux valeurs sera obtenue lors d'une mesure *donnée*; tout ce que l'on peut faire c'est indiquer les probabilités d'obtenir soit β_1 soit β_2. Ces probabilités sont respectivement égales à $|\langle\alpha|\beta_1\rangle|^2$ et $|\langle\alpha|\beta_2\rangle|^2$. C'est cette *indétermination des résultats d'une mesure* qui détermine la différence de principe existant entre les superpositions quantique et classique.

Reprenons la question des transitions quantiques traitée au § 2, mais en tenant compte maintenant du principe de superposition de la mécanique quantique. Considérons à nouveau deux niveaux d'énergie de la microparticule: E_1 et E_2. Désignons respectivement par $\langle 1|$ et $\langle 2|$ les états de la microparticule auxquels correspondent les

énergies E_1 et E_2 (ce qui signifie que la microparticule occupe le premier ou bien le second niveau d'énergie). Selon le principe de superposition, en plus des états $\langle 1 \mid$ et $\langle 2 \mid$, on peut avoir un état défini par

$$\langle f \mid = \langle f \mid 1 \rangle \langle 1 \mid + \langle f \mid 2 \rangle \langle 2 \mid. \tag{10.3}$$

Si l'on mesure l'énergie de la microparticule se trouvant dans le troisième état, on obtient soit la valeur E_1, soit la valeur E_2 (tout se passe comme si la microparticule occupait simultanément les deux niveaux d'énergie E_1 et E_2). La probabilité d'obtenir la valeur E_1 est $|\langle f \mid 1 \rangle|^2$ et celle d'obtenir la valeur E_2 est $|\langle f \mid 2 \rangle|^2$. L'occurrence d'une telle situation spécifiquement quantique lève aussitôt la contradiction que l'on avait invoquée au § 2. Il suffit d'admettre que du fait de l'interaction de la microparticule avec un rayonnement incident la microparticule se trouve dans un état de superposition tel que celui défini par (10.3). La probabilité de trouver la particule sur l'un ou sur l'autre niveau d'énergie (l'ancien ou le nouveau) sera déterminée tout simplement par le carré du module de l'amplitude d'état correspondante.

Etats mutuellement orthogonaux; discernabilité complète et partielle des états. Afin d'être parfaitement assuré de ce que le principe de superposition de la mécanique quantique n'a rien à voir avec les superpositions classiques, voyons que deviendrait la formule (10.2) lorsqu'on passe aux conceptions de la physique classique. Puisque, en physique classique, toutes les grandeurs sont simultanément mesurables, il s'ensuit qu'elles forment toutes ensemble un seul « ensemble complet ». En remarquant que les corrélations de superposition qui se reflètent dans (10.2) s'exercent entre des ensembles complets différents, on peut en conclure qu'à la limite classique ces liens disparaissent et que par suite toutes les amplitudes d'états établies de façon formelle doivent être posées égales à zéro:

$$\langle \alpha \mid \beta \rangle = 0. \tag{10.4}$$

La condition (10.4) est également applicable en mécanique quantique, mais seulement à l'intérieur d'un ensemble complet donné (donc pour des états correspondant à un seul et même ensemble). Ainsi, par exemple:

$$\langle \alpha_i \mid \alpha_j \rangle = 0, \text{ avec } i \neq j. \tag{10.5}$$

L'amplitude d'état ne peut être nulle que lorsque les deux états considérés sont *indépendants l'un de l'autre* (si la microparticule se trouve dans l'un de ces états elle ne peut être décelée dans l'autre). On dit alors que l'on a affaire à des états *mutuellement orthogonaux*. De ce point de vue tous les états d'un objet classique sont mutuellement orthogonaux, tandis qu'en mécanique quantique ne sont mutuellement orthogonaux que les états correspondant à *un seul et même* ensemble complet; les états appartenant à des ensembles *différents*

ne peuvent être mutuellement orthogonaux. Cette dernière conclusion reflète précisément le principe de superposition d'états.

La notion d'états mutuellement orthogonaux permet de préciser celle de discernabilité complète ou partielle. Pour le montrer, il est commode de se référer à l'exemple de la diffusion mutuelle de particules de même espèce que nous avons déjà examinée. Puisque les particules de même espèce sont identiques, la question de leur discernabilité se ramène à la discernabilité de leurs états (états $\langle s_1 \mid$ et $\langle s_2 \mid$; cf. § 9). Rappelons qu'au § 9 nous avons cité un exemple de microparticules parfaitement discernables: des microparticules de même espèce se trouvant dans des états de spin différents. Nous avons donc tacitement admis que les différents états de spin sont parfaitement discernables. Nous pouvons donner maintenant un *critère* de discernabilité complète et partielle: lorsque $\langle s_1 \mid s_2 \rangle = 0$, les états $\langle s_1 \mid$ et $\langle s_2 \mid$ sont complètement discernables, et lorsque $\langle s_1 \mid s_2 \rangle \neq 0$ les états considérés ne sont que partiellement discernables. Autrement dit, le critère de discernabilité complète est que les états considérés sont mutuellement orthogonaux.

Considérons le cas de la diffusion mutuelle de deux bosons de même espèce. L'expression (9.16) sera valable si les états initiaux sont mutuellement orthogonaux (par exemple, $\langle \alpha_1 \mid$ et $\langle \alpha_2 \mid$). Dans le cas où on a affaire aux mêmes états initiaux (par exemple, $\langle \alpha_1 \mid$ et $\langle \alpha_1 \mid$) c'est la formule (9.17) qui doit être utilisée. Ces deux expressions ne représentent que des cas extrêmes correspondant l'un à une discernabilité complète et l'autre à une indiscernabilité totale des microparticules. On peut avoir affaire à des situations intermédiaires, où la discernabilité est partielle et les états initiaux des microparticules correspondent à une superposition de plusieurs états mutuellement orthogonaux:

$$\begin{aligned} \langle s_1 \mid &= \langle s_1 \mid \alpha_1 \rangle \langle \alpha_1 \mid + \langle s_1 \mid \alpha_2 \rangle \langle \alpha_2 \mid, \\ \langle s_2 \mid &= \langle s_2 \mid \alpha_1 \rangle \langle \alpha_1 \mid + \langle s_2 \mid \alpha_2 \rangle \langle \alpha_2 \mid. \end{aligned} \tag{10.6}$$

On peut montrer (cf. [31]) que dans ce cas la probabilité de ce que les deux compteurs s'enclenchent en même temps est donnée par:

$$\begin{aligned} w = {} & \mid \varphi(\theta) \mid^2 + \mid \varphi(\pi - \theta) \mid^2 + \\ & + \mid \langle s_1 \mid s_2 \rangle \mid^2 [\varphi(\theta)\, \varphi^*(\pi - \theta) + \varphi^*(\theta)\, \varphi(\pi - \theta)]. \end{aligned} \tag{10.7}$$

Pour $\mid \langle s_1 \mid s_2 \rangle \mid^2 \to 0$ (10.7) se ramène à (9.16) (autrement dit, nous arrivons au cas extrême d'une discernabilité parfaite); pour $\mid \langle s_1 \mid s_2 \rangle \mid^2 \to 1$ (10.7) se ramène à (9.17) (cas extrême d'indiscernabilité totale).

Tout cela montre qu'en mécanique quantique la question de discernabilité totale ou partielle des alternatives est intimement liée au principe quantique de superposition, ou plus exactement, à l'orthogonalité ou la non-orthogonalité des états.

Les états de base. Les différents états correspondant à un seul et même ensemble complet de grandeurs sont dits *états de base*. Les amplitudes des états de base satisfont à la condition:

$$\langle \alpha_i \mid \alpha_j \rangle = \delta_{ij} \tag{10.8}$$

(δ_{ij} est le symbole dit de Kronecker; pour $i \neq j$ il est égal à zéro et pour $i = j$ il est égal à 1). La condition (10.8) est appelée *condition d'orthonormation des états de base*. Pour établir cette condition, il suffit de considérer (10.5) et de tenir compte de ce que la probabilité d'obtenir la valeur α_i dans l'état $\langle \alpha_i \mid$ est évidemment égale à 1. Une propriété importante d'un système d'états de base est que ce système est *complet*: *tout* état peut être décomposé suivant un système d'états de base.

Selon la composition de l'ensemble complet envisagé, on choisit les états de base. On peut donc utiliser différents états de base: $\{\langle \alpha_i \mid\}$, $\{\langle \beta_i \mid\}$, etc. On dit que l'on peut utiliser des *représentations différentes*.

Dans le cas d'une approche généralisée, le principe de superposition des états signifie que tout état $\langle f \mid$ d'une microparticule peut être décomposé suivant n'importe quel système d'états de base:

$$\begin{aligned} \langle f \mid &= \sum_i \langle f \mid \alpha_i \rangle \langle \alpha_i \mid, \\ \langle f \mid &= \sum_i \langle f \mid \beta_i \rangle \langle \beta_i \mid. \\ &\ldots\ldots\ldots\ldots \end{aligned} \tag{10.9}$$

La superposition des états et le passage des photons à travers les polariseurs. Le principe de superposition des états permet d'expliquer les résultats de l'expérience n° 3 exposés au § 7. Reprenons sur de nouvelles bases l'étude du passage des photons à travers le système de trois polariseurs représenté fig. 7.6. Désignons par $\langle s \mid$ l'état de polarisation des photons à la sortie du premier polariseur. Conformément au principe de superposition, l'état $\langle s \mid$ peut être considéré comme une superposition des états de base $\langle 1 \mid$ et $\langle 2 \mid$ correspondant à deux polarisations indépendantes du photon, l'une suivant l'axe et l'autre perpendiculairement à l'axe du deuxième polariseur:

$$\langle s \mid = \langle s \mid 1 \rangle \langle 1 \mid + \langle s \mid 2 \rangle \langle 2 \mid \tag{10.10}$$

(on notera que dans cet exemple le système d'états de base ne comporte que deux états). Dans le cas considéré les amplitudes des états se laissent exprimer par $\langle s \mid 1 \rangle = \cos \alpha$ et $\langle s \mid 2 \rangle = \sin \alpha$. Par suite

$$\langle s \mid = \cos \alpha \, \langle 1 \mid + \sin \alpha \, \langle 2 \mid. \tag{10.11}$$

Le deuxième polariseur ne laisse passer que les photons se trouvant dans l'état $\langle 1 \mid$. Puisque, d'après (10.11), l'état $\langle 1 \mid$ est « représenté » dans l'état $\langle s \mid$ avec une probabilité égale à $\cos^2 \alpha$, sur N photons ne

pourront traverser le deuxième polariseur que $N \cos^2 \alpha$ photons et tous les photons se trouveront dans l'état $\langle 1 \mid$ (donc polarisés le long de l'axe du deuxième polariseur). Par conséquent, à l'entrée du deuxième polariseur les photons se trouvaient pour ainsi dire partiellement dans l'état $\langle 1 \mid$ et partiellement dans l'état $\langle 2 \mid$. Lorsqu'ils pénètrent dans le deuxième polariseur cette ambiguïté d'état disparaît et les photons se retrouvent dans certains cas dans l'état $\langle 1 \mid$ et dans d'autres dans l'état $\langle 2 \mid$; les photons à l'état $\langle 1 \mid$ traversent le polariseur et les photons à l'état $\langle 2 \mid$ ne peuvent le traverser. Considérant un photon donné, il est impossible de prévoir dans quel état il se trouvera et il est donc impossible de prévoir s'il arrivera ou non à traverser le polariseur.

Nous utiliserons le même raisonnement pour étudier le comportement des photons lors de leur passage à travers le troisième polariseur. L'état $\langle 1 \mid$ se décompose alors suivant le système des états de base $\langle 1' \mid$ et $\langle 2' \mid$, correspondant l'un à une polarisation le long de l'axe du polariseur, et l'autre à une polarisation perpendiculaire à l'axe du troisième polariseur:

$$\langle 1 \mid = \sin \alpha \, \langle 1' \mid + \cos \alpha \, \langle 2' \mid. \tag{10.12}$$

Le troisième polariseur ne laisse passer que les photons se trouvant dans l'état $\langle 1' \mid$. Cet état est « représenté » dans l'état $\langle 1 \mid$ avec une probabilité égale à $\sin^2 \alpha$. Par suite, sur les $N \cos^2 \alpha$ photons ne pourront passer à travers le troisième polariseur que $N \cos^2 \alpha \sin^2 \alpha$ photons, et ces photons se trouveront à la sortie du troisième polariseur dans l'état $\langle 1' \mid$.

Supprimons maintenant le deuxième polariseur; au lieu de (10.11) et (10.12) nous aurons alors:

$$\langle s \mid = \langle s \mid 1' \rangle \, \langle 1' \mid + \langle s \mid 2' \rangle \, \langle 2' \mid, \tag{10.13}$$

où $\langle s \mid 1' \rangle = 0$ et $\langle s \mid 2' \rangle = 1$, de sorte que $\langle s \mid = \langle 2' \mid$. Il n'est donc pas étonnant que l'on ne trouve aucun photon à la sortie de ce système de polariseurs.

Le principe de superposition des états et l'interférence des amplitudes de transition. Supposons que la transition de l'état $\langle s$ à l'état $\langle f \mid$ s'effectue par l'intermédiaire d'états v. Supposons encore que dans ces états intermédiaires la microparticule n'est pas enregistrée, de sorte que l'on se trouve dans le cas d'alternatives physiquement indiscernables. L'amplitude de la transition $\langle f \mid s \rangle$ est alors donnée par:

$$\langle f \mid s \rangle = \sum_i \langle f \mid v_i \rangle \langle v_i \mid s \rangle, \tag{10.14}$$

où $\langle f \mid v_i \rangle$ et $\langle v_i \mid s \rangle$ sont les amplitudes des transitions intermédiaires. Les états intermédiaires v doivent être parfaitement discernables, sinon la notion d'alternatives discernables et indiscerna-

bles perd son sens puisque la notion même d'alternative est alors dénuée de sens. Il s'ensuit que les états intermédiaires v doivent former un système d'états de base mutuellement orthogonaux. On peut donc utiliser le principe de superposition et présenter l'état $\langle f \mid$ sous la forme

$$\langle f \mid = \sum_i \overline{\langle f \mid v_i \rangle} \langle v_i \mid, \tag{10.15}$$

où les $\overline{\langle f \mid v_i \rangle}$ représentent les amplitudes des états (le trait placé au-dessus sert à distinguer les amplitudes d'état des amplitudes de transition $\langle f \mid v_i \rangle$). En utilisant la superposition (10.15), il n'est plus nécessaire de considérer la transition de $\langle s \mid$ en $\langle f \mid$. En effet, puisque l'état $\langle f \mid$ est la superposition d'états $\langle v_i \mid$, il suffit de considérer les transitions de l'état $\langle s \mid$ dans chacun des états $\langle v_i \mid$. Cela signifie que l'amplitude de la transition $\langle f \mid s \rangle$ est donnée par la superposition des amplitudes de toutes les transitions $\langle v_i \mid s \rangle$:

$$\langle f \mid s \rangle = \sum_i \overline{\langle f \mid v_i \rangle} \langle v_i \mid s \rangle. \tag{10.16}$$

En comparant (10.16) et (10.14), on constate que

$$\overline{\langle f \mid v_i \rangle} = \langle f \mid v_i \rangle. \tag{10.17}$$

Ce dernier résultat signifie qu'au niveau de l'appareil mathématique nous avons déjà identifié l'amplitude de l'état à l'amplitude de transition. Autrement dit, dans l'appareil de la mécanique quantique les amplitudes d'état jouent en fait le même rôle que les amplitudes de transition. Notons encore que les expressions (10.14) et (10.15) sont intimement liées l'une à l'autre et par suite l'effet d'interférence des amplitudes et le principe de superposition des états le sont aussi.

Indiquons pour conclure un artifice de calcul largement utilisé dans l'appareil de la mécanique quantique. On constate aisément que si on supprime dans l'expression de l'interférence des amplitudes le symbole de l'état initial ou de l'état final, on obtient aussitôt l'expression décrivant la superposition de l'état qui subsiste. Ainsi en supprimant $\mid s \rangle$ dans le premier et le second membre de (10.14), on obtient la relation (10.11) exprimant la superposition de l'état $\langle f \mid$ (on notera que l'on utilise concurremment les symboles $\mid \rangle$ et $\langle \mid$ pour représenter les états).

Le « mécanisme de la mécanique quantique ». Nous voulons présenter ici les principaux procédés reflétant ce que Feynman appelle le « mécanisme de la mécanique quantique ». Supprimons dans les deux membres de l'égalité (10.14) l'état $\langle f \mid$. Nous obtenons

$$\mid s \rangle = \sum_i \mid v_i \rangle \langle v_i \mid s \rangle. \tag{10.18}$$

Supposons que nous utilisons un dispositif permettant de transformer un état $|s\rangle$ en un état $|s'\rangle$, ce que nous écrirons :

$$A\ |s\rangle = |s'\rangle. \tag{10.19}$$

Nous dirons que l'état $|s\rangle$ ayant été soumis à l'action d'un *opérateur A* s'est transformé en l'état $|s'\rangle$. Faisons agir l'opérateur A sur les deux membres de l'égalité (10.18) Compte tenu de (10.19) nous obtenons alors

$$|s'\rangle = \sum_i A\,|v_i\rangle\,\langle v_i\,|\,s\rangle. \tag{10.20}$$

Substituons à la place de l'état supprimé $\langle f\,|$ l'état $\langle v_j\,|$ faisant partie du système d'états de base :

$$\langle v_j\,|\,s'\rangle = \sum_i \langle v_j\,|\,A\,|\,v_i\rangle\,\langle v_i\,|\,s\rangle \tag{10.21}$$

(l'écriture $\langle v_j\,|\,A\,|\,v_i\rangle$ sous-entend $\langle v_j\,|\,v_i'\rangle$ avec $|\,v'\rangle = A\,|\,v_i\rangle$). Transcrivons enfin (10.14) en y remplaçant $|s\rangle$ par $|s'\rangle$:

$$\langle f\,|\,s'\rangle = \sum_i \langle f\,|\,v_j\rangle\,\langle v_j\,|\,s'\rangle. \tag{10.22}$$

En portant (10.21) dans (10.22), nous obtenons

$$\langle f\,|\,A\,|\,s\rangle = \sum_j \sum_i \langle f\,|\,v_j\rangle\,\langle v_j\,|\,A\,|\,v_i\rangle\,\langle v_i\,s\rangle. \tag{10.23}$$

En résumant les artifices que nous venons de présenter, écrivons la suite des égalités ainsi transformées en laissant au lecteur le soin de se pénétrer de la logique et de la beauté de ces transformations :

$$\langle f\,|\,s\rangle = \langle f\,|\,s\rangle,$$

$$\langle f\,|\,s\rangle = \sum_i \langle f\,|\,v_i\rangle\,\langle v_i\,|\,s\rangle,$$

$$|s\rangle = \sum_i |v_i\rangle\,\langle v_i\,|\,s\rangle,$$

$$A\,|s\rangle = \sum_i A\,|v_i\rangle\,\langle v_i\,|\,s\rangle,$$

$$\langle v_j\,|\,A\,|\,s\rangle = \sum_i \langle v_j\,|\,A\,|\,v_i\rangle\,\langle v_i\,|\,s\rangle,$$

$$\sum_j \langle f\,|\,v_j\rangle\,\langle v_j\,|\,A\,|\,s\rangle = \sum_j \sum_i \langle f\,|\,v_j\rangle\,\langle v_j\,|\,A\,|\,v_i\rangle\,\langle v_i\,|\,s\rangle,$$

$$\langle f\,|\,A\,|\,s\rangle = \sum_j \sum_i \langle f\,|\,v_j\rangle\,\langle v_j\,|\,A\,|\,v_i\rangle\,\langle v_i\,|\,s\rangle.$$

Supposons enfin que l'état $|s\rangle$ a été soumis d'abord à l'action de l'opérateur A, puis à celle de l'opérateur B. Si le lecteur a réussi à assimiler le « mécanisme de la mécanique quantique » (il vaudrait mieux dire « l'algèbre de la mécanique quantique »), il écrira aussitôt l'expression suivante:

$$\langle f|BA|s\rangle = \sum_k \sum_j \sum_i \langle f|v_k\rangle \langle v_k|B|v_j\rangle \langle v_j|A|v_i\rangle \langle v_i|s\rangle. \quad (10.24)$$

(l'écriture $\langle f|BA|s\rangle$ correspond à $\langle f|s''\rangle$ avec $|s''\rangle = B|s'\rangle$ et $|s'\rangle = A|s\rangle$).

Telle est en gros la structure des artifices mathématiques propres à la mécanique quantique. Dans ce qui suit nous présenterons des exemples qui permettront de donner un contenu concret à ces « manipulations » mathématiques, que nous venons de présenter sous une forme générale propice à en révéler la logique. Remarquons qu'à la base de ces « manipulations » on trouve l'idée de l'interférence quanto-mécanique (ou l'idée de la superposition), ainsi que la mise en œuvre d'un système d'états de base suivant lesquels on effectue la décomposition des états considérés.

§ 11. Les mesures en mécanique quantique

C'est à juste titre que l'on considère la question de mesure et d interprétation des résultats concernant les systèmes quantiques comme étant très compliquée et dont l'étude n'est pas encore terminée. Nous ne nous proposons pas de donner ici une discussion approfondie du problème des mesures en mécanique quantique; nous nous contenterons d'exposer certaines considérations de principe qui paraissent suffisamment éclaircies et de les illustrer par des exemples *.

Considérations relatives à l'apparition de superpositions d'états et à la signification du concept d'amplitudes d'états. Considérons une microparticule se trouvant dans un état $\langle\alpha|$. Selon le principe de superposition l'état $\langle\alpha|$ peut être décomposé suivant n'importe quel système d'états de base, par exemple, le système $\{\langle\beta_i|\}$:

$$\langle\alpha| = \sum_i \langle\alpha|\beta_i\rangle \langle\beta_i|. \quad (11.1)$$

Les nombres $\langle\alpha|\beta_i\rangle$ figurant dans la superposition (11.1) représentent les amplitudes des états $\langle\beta_i|$ ou, plus exactement, les amplitudes des probabilités caractérisant la « représentation » dans l'état $\langle\alpha|$ des différents états de base $\langle\beta_i|$.

Le lecteur connaît déjà tout ce que nous venons de dire, et il ne nous reste qu'à donner quelques précisions supplémentaires.

* Le problème des mesures en mécanique quantique est traité, par exemple, dans [2, 28, 32].

Remarquons tout d'abord que l'apparition de telle ou de telle autre superposition résulte de l'interaction de la microparticule avec son entourage. Cet entourage peut être constitué par un corps macroscopique (qu'il soit artificiel ou qu'il fasse partie d'un entourage naturel) que l'on appelle généralement un *analyseur*. L'expression (11.1) doit être interprétée comme suit: du fait de son interaction avec un analyseur donné (dans le cas considéré on peut parler d'un analyseur β), la microparticule qui se trouvait initialement dans l'état $\langle\alpha\,|$ passe à un état de superposition $\sum_i \langle\alpha\,|\,\beta_i\rangle\,\langle\beta_i\,|$. Compte tenu de la spécificité de la notion d'état de superposition propre à la mécanique quantique, on dira que par suite de son interaction avec l'analyseur β la microparticule passe simultanément dans tous les états $\langle\beta_i\,|$. L'amplitude $\langle\alpha\,|\,\beta_i\rangle$ doit alors être interprétée comme l'amplitude de la transition $\langle\alpha\,| \rightarrow \langle\beta_i\,|$ déterminée par l'interaction en question. La quantité $|\,\langle\alpha\,|\,\beta_i\rangle\,|^2$ est la probabilité de déceler en fin de compte la microparticule dans l'état $\langle\beta_i\,|$.

Il est probable que le lecteur soit tenté de poser pour le moins trois questions. *Première question*: quelle est la signification exacte de l'expression « la microparticule passe simultanément dans tous les états $\langle\beta_i\,|$ »? La réponse à cette question est effectivement donnée ci-dessous dans le sous-paragraphe intitulé « Les potentialités recelées dans les processus de mesure et leur actualisation », aussi pouvons-nous nous contenter de la remarque suivante. Bien que du fait de son interaction avec l'analyseur β la microparticule « passe simultanément dans tous les états $\langle\beta_i\,|$ », en principe on ne peut la déceler à chaque fois que dans l'un des états β. Il ne se produit donc rien de bien extraordinaire. Notons que le lecteur a déjà rencontré une situation semblable lors de l'étude des expériences 1 et 2 du § 7. Il est opportun de noter une fois de plus que la logique de la mécanique quantique n'est pas toujours évidente.

Deuxième question: Si l'amplitude d'état est en fait l'amplitude de transition, que valent les définitions des amplitudes d'état que nous avons données au § 10? Rappelons d'abord la définition que nous en avons donnée au § 10: « $\langle\alpha\,|\,\beta\rangle$ est l'amplitude de la probabilité de ce qu'une microparticule se trouvant dans l'état $\langle\alpha\,|$ peut également être décelée dans l'état $\langle\beta\,|$ ». Dans cette définition il convient de remplacer le mot « se trouvant » par « qui se trouvait », ce qui est plus correct puisque après interaction avec l'analyseur la microparticule ne se trouve plus dans l'état $\langle\alpha\,|$; avec cette rectification le mot « également » devient superflu. Avec ces rectifications la définition ci-dessus s'énonce « $\langle\alpha\,|\,\beta\rangle$ est l'amplitude de la probabilité de ce qu'une microparticule qui se trouvait dans l'état $\langle\alpha\,|$ peut être décelée dans l'état $\langle\beta\,|$ ». Déceler une microparticule sous-entend un certain acte de mesure, de sorte que $\langle\alpha\,|\,\beta\rangle$ joue le rôle d'amplitude de la transition $\langle\alpha\,| \rightarrow \langle\beta\,|$, qui se produit lors

de la mesure. Notons que l'interaction de la microparticule avec l'analyseur est un des éléments du processus de mesure, dont il sera question ci-dessous.

Troisième question: nous avons convenu (cf. § 8) d'énoncer les amplitudes de transition en lisant de droite à gauche; si $\langle \alpha \mid \beta_i \rangle$ est aussi une amplitude de transition, on devra l'énoncer en lisant de gauche à droite, ce qui serait susceptible de donner lieu à confusion. En effet, si on applique rigoureusement la convention selon laquelle on doit noter les états antérieurs à droite des états consécutifs, l'égalité (11.1) devrait s'écrire:

$$\sum_i |\beta_i\rangle \langle \beta_i | \alpha \rangle = |\alpha\rangle. \tag{11.1a}$$

Cependant on n'utilise généralement pas cette notation; c'est pourquoi nous préférons être inconséquents que de risquer la confusion et de conserver dans ce qui suit les deux termes « amplitude d'état » et « amplitude de transition ». Rencontrant tantôt l'un tantôt l'autre terme, le lecteur doit bien se rappeler que du point de vue du contenu physique l'amplitude d'état n'est rien d'autre que l'amplitude de transition (du point de vue mathématique cette équivalence a été démontrée au paragraphe précédent).

Exemples d'analyseurs. Chaque fois que le lecteur rencontrait dans le texte une interférence des amplitudes de transition, il avait, en fait, affaire à un analyseur. Donnons-en quelques exemples.

Premier exemple [cf. (9.3)]: l'analyseur est un écran comportant deux fentes, qui fait apparaître la superposition

$$\langle s \mid = \langle s \mid A \rangle \langle A \mid + \langle s \mid B \rangle \langle B \mid. \tag{11.2}$$

Deuxième exemple [cf. (9.35)]: l'analyseur est un réseau cristallin constitué par des noyaux atomiques identiques et dénués de spin, qui fait apparaître la superposition

$$\langle s \mid = \sum_i^N \langle s \mid i \rangle \varphi \langle i \mid. \tag{11.3}$$

Troisième exemple [cf. (9.39)]: l'analyseur est constitué par un champ magnétique non homogène B_1, qui fait apparaître la superposition

$$\langle s \mid = \sum_i \langle s \mid i \rangle \langle i \mid. \tag{11.4}$$

On peut dire que tout analyseur faisant apparaître une certaine superposition d'états détermine en fait l'apparition d'alternatives indiscernables dont le nombre est égal au nombre d'états de base figurant dans cette superposition. Dans le premier exemple cité le nombre d'alternatives est égal à deux (égal au nombre de fentes pratiquées dans l'écran), dans le deuxième exemple il est égal au nombre

de noyaux atomiques contenus dans le cristal utilisé et dans le troisième exemple il est égal au nombre d'états de spin (donc à $2s + 1$, s étant le spin de l'atome).

Le processus de mesure. En mécanique quantique tout processus de mesure comporte trois étapes successives : 1) une *étape préparatoire* consistant à mettre la microparticule dans un certain état $\langle\alpha|$ auquel on se réfère ensuite comme à l'état *initial* ; 2) une *étape de travail* lors de laquelle se produit l'interaction de la microparticule « conditionnée » avec un analyseur déterminé qui a pour fonction de faire passer la microparticule dans un *état de superposition* ; 3) une *étape de détection* au cours de laquelle on décèle la microparticule dans l'un des états de base figurant dans la superposition. Lors de cette troisième et dernière étape, la microparticule entre en interaction avec un corps macroscopique qui est susceptible de modifier son état sous l'action de la microparticule ; ce corps macroscopique porte le nom de *détecteur*.

Si on omet, pour simplifier, l'étape préparatoire, le « schéma » abstrait d'un processus de mesure peut être conventionnellement représenté de la façon suivante :

$$\langle s| \xrightarrow{1} \sum_i \langle s|\beta_i\rangle\langle\beta_i| \xrightarrow{2} \langle\beta_i|. \tag{11.5}$$

La flèche 1 marque l'étape de travail et la flèche 2 l'étape de détection.

Par conséquent, les principaux éléments d'un dispositif de mesure sont l'*analyseur* et le *détecteur*. Nous avons déjà élucidé le rôle de l'analyseur, aussi nous reste-t-il à examiner celui du détecteur. On peut dire d'une manière imagée qu'il a pour fonction d'« observer à la dérobée » le comportement de la microparticule se trouvant dans la superposition d'états dans laquelle elle a été mise par l'analyseur. En nous référant aux exemples d'analyseurs que nous avons donnés ci-dessus, on peut dire que cette fonction du détecteur consiste à fournir des réponses aux questions suivantes : à travers quelle fente est passé l'électron considéré ? sur quel noyau atomique du réseau cristallin a été diffusé un neutron donné ? dans quel état de spin se trouve un atome donné ? Puisque le lecteur connaît déjà les résultats auxquels avaient conduit les différents procédés d'observation (voir notamment les résultats de l'expérience n° 2 du § 7), il peut aussitôt prévoir que l'intervention du détecteur doit entraîner la destruction de la superposition d'états. Le détecteur révèle chaque fois la microparticule dans l'un des états qui faisaient partie de la superposition et le fait de la révéler détermine la *destruction de la superposition*. Du point de vue des considérations que nous avons développées aux §§ 8 et 9 cela signifie que le détecteur transforme les alternatives indiscernables en alternatives discernables et par suite détruit l'interférence des amplitudes de transition.

Dégageons du « schéma » (11.5) l'étape de détection, consistant en une interaction de la microparticule avec le détecteur :

$$\sum_i \langle s \mid \beta_i \rangle \langle \beta_i \mid \rightarrow \langle \beta_i \mid. \tag{11.6}$$

On dit souvent qu'un « schéma » tel que (11.6) décrit un processus ramenant la superposition $\sum_i \langle s \mid \beta_i \rangle \langle \beta_i \mid$ à l'état $\langle \beta_i \mid$. Ce processus est connu sous le nom de « réduction du paquet d'onde ».

Nous voyons donc que tandis que l'analyseur crée une certaine superposition d'états, le détecteur la défait en la ramenant à un des états qui la constituait. Voyons quelle information peut alors recueillir l'observateur. Il est évident que si le « schéma » (11.5) a été vérifié en utilisant une seule microparticule, on ne peut espérer obtenir des informations dignes d'intérêt. Il est indispensable de répéter l'acte de mesure sur un nombre suffisamment grand de microparticules. Dans ces conditions l'observateur peut établir tout d'abord quelles valeurs des grandeurs physiques de l'ensemble β se réalisent dans la pratique, et deuxièmement quelle est la fréquence d'apparition des différents états β de la microparticule. Disposant de ces données, on peut établir sur une base expérimentale aussi bien le spectre des valeurs des grandeurs appartenant à l'ensemble β que les probabilités $|\langle s \mid \beta_i \rangle|^2$.

Remarques concernant certaines particularités des processus de mesure en mécanique quantique. Remarquons tout d'abord que tout processus de mesure modifie radicalement la microparticule. Ainsi le changement de l'état initial de la microparticule lors des mesures présente un caractère de principe. On sait que lors des mesures sur des corps macroscopiques on peut faire abstraction des moyens d'observation utilisés. En mécanique quantique il est par principe impossible de le faire puisqu'on ne peut négliger l'interaction de la microparticule avec son entourage.

Le « schéma » d'un processus de mesure, plus particulièrement l'étape décrite par (11.6), met en relief que le comportement des microparticules est dans une large mesure aléatoire. On ne peut en effet prévoir de manière univoque dans quel état β concret se trouvera en fin de compte la particule décelée.

Une autre particularité des processus de mesure de la mécanique quantique est que la visualisation est impossible, qu'il s'agisse de la première étape du processus (lorsque l'analyseur crée une superposition d'états) ou de la deuxième (lorsque le détecteur réduit la superposition qui a été créée dans l'analyseur à un seul état). On ne peut évidemment pas considérer que lors de la première étape du processus de mesure la microparticule se trouve réellement éparpillée parmi les différents états de la superposition (ce qui reviendrait à admettre, par exemple, que la microparticule passe « en partie » par la première et en partie par la deuxième fente dans l'expérience du passage

des microparticules à travers les fentes d'un écran opaque). De même, on ne peut considérer que la microparticule « éparpillée » parmi ses différents états se trouvera subitement concentrée dans l'un de ces états dès que le détecteur assumera ses fonctions de détection vis-à-vis d'elle. Il est curieux que c'est justement la dernière étape du processus de mesure qui a fait l'objet de nombreux débats. Il n'est pas étonnant que les partisans de l'interprétation classique (sur modèle) des microparticules et des microprocessus se trouvaient dans une impasse dès qu'ils essayaient de visualiser la « réduction d'un paquet d'onde ». Etant donné que les états faisant partie d'une superposition peuvent être répartis dans l'espace, la « réduction du paquet d'onde » devrait se concevoir comme un processus instantané de localisation de là microparticule. On a largement utilisé l'exemple suivant. Un paquet d'onde entre en interaction avec un miroir semi-transparent (le miroir joue ici le rôle d'analyseur); une partie du paquet passe à travers le miroir et l'autre partie est réfléchie (cela correspond à un « étalement » de la microparticule sur les deux états de la superposition). Sur les trajets de chacune des deux parties du paquet on dispose des détecteurs. On sait qu'à chaque expérience un seul des détecteurs se déclenche. Supposons qu'à un certain moment c'est le détecteur placé sur le trajet de la partie réfléchie du paquet d'onde qui s'est déclenché. Cela signifie que l'autre partie du paquet d'onde se trouvant dans la région de l'espace où se trouve placé le second détecteur doit instantanément disparaître et réapparaître juste avant l'acte de détection à proximité du premier détecteur. L'absurdité d'un tel « comportement » d'une microparticule, qui d'ailleurs ne peut « savoir » lequel des deux détecteurs se déclenchera dans le cas considéré, est évidente.

Voulant à tout prix sauvegarder l'interprétation classique, certains cherchent à traiter la superposition d'une manière classique. Cela revient à supposer qu'après interaction avec l'analyseur la microparticule se trouve dans un certain état de base, de sorte que le détecteur n'a d'autre fonction que de rendre évident un fait accompli — préciser dans quel état de base est passée la microparticule lors de son interaction avec l'analyseur. Tout devient alors très simple: le détecteur confirme le fait que lors de son interaction avec le miroir le paquet d'onde considéré a été réfléchi et non pas transmis à travers le miroir.

Or ce mode de raisonnement est depuis longtemps périmé, comme le montrent les considérations développées à propos des résultats de l'expérience n° 1 du § 7. Nous avons montré en effet que s'il était possible d'admettre que dans certains cas la microparticule passe à travers l'une, et dans d'autres cas à travers l'autre fente de l'écran, on n'observerait pas de figures d'interférence sur l'écran détecteur. Autrement dit, la conception classique de la superposition d'états équivaut à une suppression de la superposition. Or on doit bien

admettre que tant que le détecteur n'aura pas détecté la microparticule, elle se trouve dans un état de superposition $\sum_i \langle s \mid \beta_i \rangle \langle \beta_i \mid$, et non pas dans l'un quelconque des états $\langle \beta_i \mid$. Quant à la question de la visualisation de cette situation, il ne reste qu'à la considérer comme dénuée de sens. Les discussions concernant les mesures en mécanique quantique (et plus particulièrement, le problème de la « réduction du paquet d'onde ») apportent une preuve indubitable de l'impossibilité de principe de toute interprétation classique de la microparticule.

Remarques concernant le détecteur. En règle générale le détecteur d'un dispositif de mesure quanto-mécanique est un système macroscopique se trouvant dans un état à tel point instable que cet état peut être modifié par une micro-action, donc par l'action pouvant être exercée par une microparticule. Pour qu'une microparticule puisse se manifester de manière observable, elle doit provoquer une véritable « catastrophe » à l'échelle des microprocessus.

A titre d'exemple de tels événements catastrophiques, citons la formation de gouttelettes de brouillard dans la chambre de Wilson ou de bulles dans une chambre à bulles, les processus chimiques s'étendant à tout un grain d'une émulsion photographique, la génération en avalanche d'électrons dans un photomultiplicateur, etc. La microparticule que l'on cherche à détecter peut périr dans la « catastrophe » qu'elle aura provoquée (c'est ce qui se produit lors de l'enregistrement de photons dans les photomultiplicateurs, ou lors de l'enregistrement d'électrons par un écran détecteur). Cependant on rencontre des situations plus curieuses, lorsque la microparticule « confie » le soin de provoquer la catastrophe à d'autres microparticules. Ainsi, par exemple, dans la chambre de Wilson l'électron « observé » crée sur son trajet des ions et chacun de ces ions se comporte comme un centre de condensation pour la vapeur sursaturée remplissant la chambre. Ce sont ces ions qui provoquent les événements « catastrophiques » qui se manifestent à l'attention de l'observateur sous forme de gouttelettes d'eau qui forment la trace du passage de l'électron « observé ». On notera que cette trace est constituée par l'ensemble d'événements macroscopiques consécutifs, donc à l'échelle des microphénomènes l'ensemble d'événements catastrophiques.

Les potentialités recelées dans les processus de mesure et leur actualisation. Lorsque nous débattons la signification du principe quanto-mécanique de superposition, nous nous trouvons dans la même situation que celle que nous avons connue dans le cas de la discussion sur la signification du dualisme onde-corpuscule (cf. § 5). Dans les deux cas on doit renoncer à toute tentative de visualisation classique et nous avons à débattre du problème des potentialités et de leur actualisation.

En dialectique matérialiste on connaît bien les deux catégories, celle de *potentialité* et celle d'*actualité*. La *contradiction* qui existe entre ces catégories est levée toutes les fois que les potentialités se trouvent actualisées de quelque manière que ce soit. Toute situation concrète recèle de nombreuses potentialités, mais une seule se trouve actualisée. Le processus d'actualisation d'une potentialité est irréversible en ce sens que dès qu'elle est actualisée, la situation initiale change qualitativement (la potentialité qui se réalise rend inex stan-

tes toutes les autres potentialités qui s'offraient initialement). La potentialité actualisée crée une situation nouvelle qui recèle elle aussi de nouvelles potentialités. Par suite, le processus de la levée des contradictions entre la potentialité et l'actualité est inépuisable.

En mécanique classique (de même que dans toute théorie de type dynamique) le problème de la différenciation du potentiel et de l'actuel ne se pose pas, puisque ces théories ne comportent aucun élément aléatoire. Ce problème n'apparaît que dans les théories statistiques. Comme la mécanique quantique présente par principe un caractère statistique, et que l'on y discerne des éléments aléatoires même dans le comportement d'une seule microparticule, le problème de la potentialité et de l'actualité joue un rôle important dans l'étude des microparticules et des microphénomènes.

C'est justement du point de vue de la levée des contradictions entre les potentialités et les actualités que l'on doit envisager les processus de mesure en mécanique quantique. Lorsqu'une particule séjourne dans un état de superposition, on se trouve en présence d'une situation où la microparticule présente un ensemble déterminé de potentialités. C'est la bonne manière d'interpréter le principe quantomécanique de superposition des états. C'est lors de l'interaction d'une microparticule avec un détecteur [cf. (11.6)] que se trouve levée la contradiction entre les potentialités et l'actualité : la superposition des alternatives possibles est détruite pour faire place à une alternative actualisée. On peut dire que la formule (11.6) est l'expression mathématique d'un processus dans lequel est levée la contradiction entre les potentialités et leur actualisation. L'acte correspondant se présente comme un *saut irréversible* et *incontrôlable*.

En terminant ce paragraphe, nous voulons souligner que les problèmes d'interférence des amplitudes, de la superposition des états et des mesures ne sont nullement des problèmes isolés, mais forment un tout indissociable. Aussi recommanderons-nous au lecteur de relire les paragraphes 7-11 afin de se faire une idée d'ensemble des bases physiques de la mécanique quantique.

INTERMÈDE

DE QUELLES ONDES S'AGIT-IL ? RETOUR SUR LE CONCEPT D'ONDES EN MÉCANIQUE QUANTIQUE

Personnages : l'Auteur et le Lecteur

LECTEUR : J'aimerais revenir sur la question de la superposition classique. Parfois une pensée insidieuse me vient à l'esprit : et pourquoi donc cette superposition ne serait pas valable ? En tout cas elle explique mieux le phénomène d'interférence que ne le fait le concept de superposition des amplitudes. Je reconnais toute la valeur des conceptions quanto-mécaniques basées sur la mise en œuvre des amplitudes de probabilité, et cependant le doute ne cesse de me taquiner l'esprit.

AUTEUR : Il est exact que la superposition classique explique fort bien le phénomène d'interférence. Mais que faire alors avec nos expériences où nous essayons de « surprendre » le comportement des microparticules dans un interféromètre (par exemple, dans le cas de l'écran à fentes) ? L'expérience montre que l'interférence s'en trouve détruite, mais la superposition classique n'arrive pas à expliquer ce résultat.

LECTEUR : Et si cependant l'interprétation classique était capable d'interpréter la destruction de l'interférence ?

AUTEUR : Non, il est en principe impossible de donner une interprétation de ce fait. Et c'est une conséquence du problème de la « réduction du paquet d'onde » que nous avons considéré ci-dessus. Toute interprétation classique de la microparticule est à exclure et par suite se trouve exclue toute possibilité d'interprétation classique des effets d'interférence que l'on observe dans les expériences avec des microparticules.

LECTEUR : Il s'ensuit donc que les ondes de De Broglie n'ont rien à voir avec les ondes classiques ?

AUTEUR : Ce que l'on peut affirmer en tout cas c'est qu'elles ne sont pas des ondes classiques.

LECTEUR : Par conséquent, la diffraction des électrons n'a rien à voir avec les processus ondulatoires classiques ?

AUTEUR : Aucunement.

LECTEUR : On ne peut alors manquer de s'étonner en voyant l'emploi fréquent du terme « ondes » en mécanique quantique : dualisme onde — corpuscule, ondes de De Broglie, fonction d'onde, équation d'onde. La mécanique quantique elle-même est parfois désignée sous le nom de mécanique ondulatoire.

AUTEUR : La terminologie se forme dans des circonstances historiques concrètes, et elle n'est pas toujours adéquate. Il est vrai que le terme « onde » est utilisé trop souvent et de façon parfois injustifiée dans l'étude des microphénomènes. Nous sommes habitués à considérer l'interférence comme un effet typiquement ondulatoire. Aussi n'est-ce pas étonnant que lorsqu'en 1927 dans les expériences avec des électrons les chercheurs ont observé une image d'interférence, ils ont aussitôt mis en usage le terme « ondes électroniques ». Or l'interférence électronique a une origine plus subtile, puisqu'elle provient de ce que les lois naturelles de la probabilité qui ne se conforment pas à la loi d'additions des probabilités exigent que soit respectée la règle d'addition des amplitudes des probabilités. Mais tout au début on ne s'en doutait pas et entre temps une terminologie peu heureuse s'est implantée dans toutes les publications.

LECTEUR : Et où en est-on avec les grandeurs ondulatoires telles que le vecteur d'onde de l'électron ou la longueur d'onde, qui figurent bien dans les formules mathématiques ?

AUTEUR : Ce sont des caractéristiques ondulatoires des microparticules et non pas des paramètres d'une onde classique.

LECTEUR : Mais les ondes lumineuses classiques ou, ce qui revient au même, les ondes photoniques existent bien et le vecteur d'onde et la longueur d'onde ne seraient donc pas des paramètres caractéristiques de ces ondes?
AUTEUR : Dans ce cas nous nous trouvons en présence d'une situation qualitativement particulière. Cette question est fort intéressante. Remarquons que les photons font partie de la classe des bosons et que de ce fait ils tendent à s'accumuler dans certains états. Supposons que les photons se trouvent dans un état caractérisé par les grandeurs $\vec{k}$, ω, α (α est la polarisation des photons); cet état est appelé état $k\alpha$. Supposons que cet état soit occupé par un photon; tant qu'il n'y a qu'un seul photon, il n'y a pas d'onde classique. Mais si cet état commence à être occupé par un nombre de plus en plus grand de photons, à un certain moment ce nombre devient suffisamment grand pour qu'apparaisse une onde lumineuse classique qui sera caractérisée par les mêmes paramètres que ceux de l'état photonique. Dès lors on peut parler de paramètres d'une onde classique : vecteur d'onde $\vec{k}$, fréquence ω, polarisation α. On assiste donc à une sorte de « transformation » des propriétés ondulatoires des photons en paramètres d'une onde. On notera que cela résulte d'une accumulation de photons dans un seul et même état. L'onde classique est donc la manifestation d'un effet collectif!

Si maintenant on considère des électrons, un effet collectif est en principe exclu, puisque les électrons étant des fermions ne peuvent occuper les états disponibles qu'individuellement. Il ne peut donc exister d'ondes classiques correspondant aux électrons et, d'une manière plus générale, aux microparticules de la classe des fermions.
LECTEUR : Cette fois-ci j'ai l'impression que je commence à comprendre la place qu'occupent les ondes en mécanique quantique. Si j'ai bien compris, dans une collectivité de bosons une interférence classique peut bien avoir lieu et par conséquent une superposition classique.
AUTEUR : C'est exact et ce n'est pas par hasard qu'on avait observé l'interférence de la lumière bien avant celle des électrons.
LECTEUR : Ainsi donc on peut discerner dans la Nature deux phénomènes d'interférence : l'interférence classique résultant de l'addition d'ondes et l'interférence quanto-mécanique déterminée par l'addition des amplitudes de probabilités.
AUTEUR : Dans les conditions usuelles, l'interférence classique s'il s'agit d'une collectivité de bosons) « masque » l'interférence quanto-mécanique. Mais dans le cas d'électrons, rien ne peut masquer l'effet qui se manifeste alors à l'état pur.
LECTEUR : Puisque en mécanique quantique on ne peut parler d'ondes que dans le cas de bosons et encore à la condition que la population bosonique des états soit suffisamment dense. ne pensez-vous pas qu'il serait tout indiqué de ramener la « terminologie ondulatoire » à sa juste proportion?
AUTEUR : Je ne voudrais pas que l'on touche à la terminologie adoptée. Ce n'est pas tellement la terminologie qui compte, mais une bonne compréhension des idées qu'elle recouvre. Si cependant on pouvait choisir, il serait bon d'utiliser une terminologie plus adéquate au sens des choses. C'est pour cette raison que nous utilisons ici le terme « amplitude de probabilité » au lieu du terme « fonction d'onde ». Il nous semble que le premier terme est mieux approprié, bien que ce soit le second que l'on utilise plus fréquemment.
LECTEUR : J'ai déjà remarqué que jusqu'ici vous n'avez pas dit un seul mot de la *fonction d'onde*, bien que tous les ouvrages de mécanique quantique l'utilisent constamment.
AUTEUR : C'est pourquoi nous introduirons en temps utile la fonction d'onde. En fait nous l'utilisons depuis longtemps puisque les termes « amplitude de probabilité » et « fonction d'onde » sont de même essence. Mais tant qu'il ne s'agit que des fondements physiques de la mécanique quantique, il vaut mieux

ne parler que des amplitudes de probabilité. Ce n'est qu'en abordant l'étude de l'appareil mathématique de la théorie qu'il devient opportun d'introduire la fonction d'onde.

Pour conclure, je voudrais souligner que ce qui importe, ce ne sont pas les termes que l'on utilise, mais la manière dont on en use. On peut fort bien utiliser le terme « onde » en parlant de microparticules, mais il importe de ne pas perdre de vue le caractère spécifique de ce mot. Rappelons à ce propos les remarques de § 5 concernant l'inadéquation de la représentation d'un électron lié sous forme d'une onde classique se trouvant dans un résonateur.

§ 12. Le principe de causalité en mécanique quantique

Le fait qu'il soit impossible de prévoir le comportement d'une microparticule donnée lors d'une mesure a conduit certains à affirmer que la mécanique quantique serait « indéterministe ». On allait jusqu'à supposer que la causalité serait inexistante dans les microprocessus, y étant remplacée par un hasard incontrôlable. Mais le temps aidant, les considérations de ce genre ont commencé à céder le pas à une meilleure compréhension des particularités de l'évolution dans le temps des processus auxquels participent des microparticules. Les lamentations au sujet du soi-disant indéterminisme de la mécanique quantique n'avaient aucune raison d'être ; on s'est bien rendu compte qu'en mécanique quantique le principe de causalité est bien applicable, mais qu'il se manifeste tout autrement que dans le cas du déterminisme classique de l'ancienne physique.

Spécificité de la conception quanto-mécanique de la causalité. En mécanique quantique le principe de causalité concerne les potentialités d'actualisation des événements (ou des propriétés). Cela signifie qu'en mécanique quantique la causalité concerne non pas les *événements qui ont été actualisés*, mais les *potentialités d'actualisation* de ces événements. C'est là que réside l'essence de la conception quanto-mécanique de la causalité. Dans son discours de prix Nobel, Pauli a dit notamment : « *...en mécanique quantique il ne s'agit que d'événements possibles et non pas d'événements qui ont effectivement lieu. Cela se traduit à peu près par des expressions telles que : « cela est impossible »* ou *bien « l'un et l'autre sont possibles »*; *au grand jamais on ne saurait affirmer « cela se produira à tel moment et à tel endroit. »*

Tout en tenant compte de la spécificité de la conception quanto-mécanique de la causalité, nous voulons expressément souligner toute la différence qui existe en mécanique quantique entre ce qui *n'est qu'à l'état de potentialité* et ce qui *est actualisé*. Nous voulons noter encore le caractère objectif des potentialités, déterminé tant par les propriétés des microparticules que par les conditions ambiantes.

Puisque, en mécanique quantique, le potentiel et l'actualisé sont identiques, lors du passage de la mécanique quantique à la mécanique classique les corrélations entre les événements possibles doivent se ramener à une relation de causalité entre les événements actualisés. De ce point de vue le principe de causalité de la mécanique

quantique représente une généralistion du principe du déterminisme classique et se réduit à ce dernier lorsqu'on passe de l'étude de microphénomènes à celui de macrophénomènes.

Comment la causalité se manifeste-t-elle dans les microphénomènes? On peut se poser la question suivante : puisque en mécanique quantique la causalité concerne non pas les événements actualisés, mais les potentialités de leur actualisation, comment un observateur peut-il mettre à profit une telle causalité ? En effet, dans toute expérience il a, en fin de compte, toujours affaire à des événements actualisés.

La réponse à cette question est la suivante. L'observateur doit répéter maintes fois le même acte de mesure ; pour ce faire, il doit disposer d'une *collection* suffisamment riche de microparticules identiques, qui à chaque nouvelle expérience doivent se trouver dans les mêmes conditions extérieures. Dans chaque acte de mesure se trouvera actualisée une valeur aléatoire de la grandeur que l'on détermine. Cependant une collection de ces différentes valeurs aléatoires permet de déterminer pour cette grandeur la *loi de répartition* et la *valeur moyenne* ; or cette loi et cette valeur moyenne peuvent être prévues *a priori*. La possibilité de faire de telles prévisions reflète l'existence de relations de causalité entre les potentialités d'événements.

Considérons l'exemple suivant. Supposons que pour un état $\langle\alpha|$ on mesure les grandeurs d'un ensemble β. Après avoir effectué un grand nombre de mesures identiques, l'observateur disposera d'une collection de valeurs $\beta_1, \beta_2, \beta_3, \ldots$ Lorsque le nombre de valeurs ainsi déterminées sera N, il pourra calculer la valeur moyenne

$$\langle\beta\rangle = \frac{1}{N}\sum_i^N \beta_i. \tag{12.1}$$

Supposons que le lendemain (ou l'année suivante) l'observateur décide de recommencer les mêmes mesures. Il obtiendra alors une certaine collection de valeurs $\beta_{1'}, \beta_{2'}, \beta_{3'}, \ldots$ Cette nouvelle collection de valeurs sera différente de celle qui avait été obtenue antérieurement, mais la valeur moyenne calculée à l'aide d'une formule telle que (12.1) sera peu différente de la valeur moyenne $\langle\beta\rangle$ calculée précédemment (à condition bien sûr que N soit suffisamment grand). Cela signifie que l'observateur aurait pu s'épargner la peine de refaire les mesures, puisque la valeur moyenne $\langle\beta\rangle$ pouvait être prédéterminée sur la base de la première série de mesures.

Et qui plus est, la valeur moyenne $\langle\beta\rangle$ pouvait être calculée sans qu'il fût nécessaire d'effectuer des mesures. Il est vrai que pour ce faire l'observateur aurait dû connaître les amplitudes $\langle\alpha|\beta_i\rangle$ correspondant à la superposition

$$\langle\alpha| = \sum_i \langle\alpha|\beta_i\rangle\langle\beta_i|. \tag{12.2}$$

Pour calculer $\langle\beta\rangle$ on utilise la formule

$$\langle\beta\rangle = \sum_i \beta_i \, |\langle\alpha \,|\, \beta_i\rangle|^2. \tag{12.3}$$

Nous pensons que le lecteur a déjà compris le fond du problème qui consiste en ce que la relation de causalité entre des événements potentiels équivaut à une relation de causalité entre les probabilités d'actualisation de ces événements. Bref, les prévisions de la mécanique quantique ont un *caractère probabiliste*! Pour prédéterminer la valeur de $\langle\beta\rangle$ dans l'état $\langle\alpha\,|$, on doit connaître les probabilités $|\langle\alpha \,|\, \beta_i\rangle|^2$ d'actualisation des valeurs β_i dans un état donné. Dans le cas où nous ne connaissons d'avance ces probabilités, on doit commencer par déterminer la *statistique* des résultats de mesures de la grandeur β_i, puis de calculer sur cette base les probabilités en cause.

Pour bien résumer ces différentes remarques, nous citerons les paroles de Fock [1]: « *La probabilité de ce qu'une microparticule se comporte d'une certaine manière dans des conditions extérieures données dépend aussi bien des propriétés internes de la microparticule que des conditions dans lesquelles elle se trouve. Cette probabilité représente une estimation quantitative des potentialités de comportement de la microparticule et se manifeste par le nombre relatif de cas actualisés d'un comportement donné. Ce nombre représente une commune mesure. Ainsi la probabilité concerne chacune des microparticules et caractérise ses potentialités, mais pour déterminer sa valeur numérique on doit disposer d'une statistique des cas d'actualisation de ces potentialités, ce qui présuppose une répétition multiple des mêmes expériences.* »

La causalité dans les théories statistiques. Nous avons déjà signalé au § 6, à la suite de nos considérations sur les potentialités et leur actualisation, que la mécanique quantique est une *théorie statistique*. Aussi la question de la causalité en mécanique quantique peut-elle être traitée tout d'abord en considérant les manifestations du principe de causalité dans les théories statistiques en général (y compris les théories classiques telles que la mécanique statistique, la physique cinétique, l'électrodynamique microscopique).

Dans toute théorie statistique le nécessaire et le contingent se manifestent comme des *catégories dialectiques*; les corrélations qui existent entre eux s'expriment comme l'unité et la lutte des contraires. Dans un gaz les vitesses des molécules sont aléatoires (la répartition instantanée des vitesses des molécules est aléatoire) mais l'existence d'une vitesse moyenne est nécessaire. L'impact d'un électron ayant traversé un écran à fentes en un point de l'écran détecteur est aléatoire, mais l'apparition d'une image d'interférence résultant de tous les impacts est nécessaire. Tout comme le contingent, le nécessaire se manifeste dans toute théorie statistique, et c'est le nécessaire qui détermine les relations de causalité. Par suite, dans les théories

statistiques la question de la manifestation du *principe de causalité* se ramène à la question de la manifestation dans ces théories du *nécessaire*.

Tandis que dans les théories dynamiques le nécessaire règne en maître, ce qui entraîne la possibilité de prédire *exactement* les valeurs que peuvent prendre les grandeurs physiques, dans les théories statistiques le nécessaire s'exprime par les *lois de répartition* qui ne définissent que les valeurs *probables* des grandeurs physiques.

Dans les théories statistiques le nécessaire se manifeste encore par l'existence des *lois de conservation*. On sait que l'on peut considérer les lois de conservation comme des *principes d'interdiction*. De ce point de vue le rôle que jouent les lois de conservation dans les théories statistiques apparaît assez nettement : les lois de conservation jouent le rôle de conditions susceptibles de rendre nulle la probabilité d'occurrence de certains processus.

Caractère statistique de la mécanique quantique. En classant la mécanique quantique parmi les théories statistiques, on doit remarquer qu'elle occupe parmi ces théories une place particulière. Dans le cadre de la physique classique les lois statistiques concernent le comportement de grands ensembles de corpuscules, tandis que le comportement de chacun des corpuscules obéit aux lois de la dynamique. Lorsque la mécanique quantique envisage le comportement aléatoire d'une seule microparticule, elle se place dans une situation particulière, celle de la *théorie statistique d'une seule particule*. C'est pour cela que nous avons dit que la mécanique quantique est par principe une théorie statistique.

C'est cette circonstance qui prédétermine le caractère spécifique des *collectifs statistiques* en mécanique quantique.

Fock disait à ce propos [1] : « *en qualité d'éléments des collectifs statistiques de la mécanique quantique on doit considérer non pas les microparticules elles-mêmes, mais les données expérimentales les concernant, en remarquant toutefois qu'à des conditions expérimentales données correspond un collectif déterminé* ». Ci-dessus nous avons considéré que lorsqu'une microparticule se trouvant dans l'état $\langle\alpha|$ était soumise à des mesures ayant pour but la détermination des grandeurs d'un ensemble β, la répétition de ces mesures permettait d'obtenir une collection de valeurs numériques $\beta_1, \beta_2, \beta_3, \ldots$ Cette collection de valeurs numériques représente justement l'exemple d'un collectif statistique de la mécanique quantique. Un examen de la formule (12.3) permet de conclure que $|\langle\alpha|\beta_i\rangle|^2$ joue le rôle de *fonction de répartition* pour le collectif statistique considéré. Si on modifie l'expérience (par exemple, pour procéder à la détermination des grandeurs d'un ensemble γ), l'observateur se trouvera en présence d'un autre collectif statistique : $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \ldots$ On en conclut qu'à une seule microparticule on peut faire correspondre plusieurs collectifs statistiques.

On se rend aisément compte de ce que les collectifs classiques et les collectifs statistiques sont de nature différente. En physique classique un collectif statistique est constitué par un grand nombre de particules, tandis qu'en mécanique quantique il est constitué par un grand nombre de modes potentiels d'actualisation des propriétés d'une microparticule se trouvant dans des conditions ambiantes données ; toute modification de ces conditions fait apparaître un nouveau collectif statistique. Cette différence se manifeste notamment en ce qu'en physique classique on prend la moyenne par rapport à *différents* états du système, tandis qu'en mécanique quantique il s'agit de valeurs moyennes concernant un état *donné* du système considéré (dans l'exemple donné ci-dessus il s'agissait de la valeur moyenne $\langle \beta \rangle$ dans l'état $\langle \alpha \mid$).

Il est évident qu'en mécanique quantique on se trouve obligé de prendre des moyennes par rapport à des états différents et de considérer des collectifs statistiques. Cependant ce type de problèmes déborde le cadre de la mécanique quantique proprement dite et fait l'objet de la *statistique quantique*. La statistique quantique a affaire à *deux* types de collectifs statistiques, aussi peut-on dire que c'est une théorie *doublement* statistique.

Équation quanto-mécanique exprimant le principe de causalité. Considérons l'amplitude d'état suivante

$$C_j(t) = \langle s(t) \mid j \rangle. \tag{12.4}$$

C'est l'amplitude de la probabilité de trouver dans l'état de base j une microparticule qui se trouvait à un instant t dans l'état s (à l'instant t le détecteur entre en action et décèle la microparticule dans l'un des états). La relation de causalité entre les probabilités d'actualisation des événements, qui est propre à la mécanique quantique, doit se manifester dans l'existence d'une corrélation entre les amplitudes correspondant aux instants t et $t + \Delta t$. En tenant compte du principe de superposition, nous pouvons exprimer la corrélation entre les amplitudes sous forme de l'équation linéaire

$$C_i(t+\Delta t) = \sum_j U_{ij}(t, \Delta t)\, C_j(t) \tag{12.5}$$

(dans le second membre la somme est étendue à tous les états de base).

Représentons les coefficients du développement de $U_{ij}(t, \Delta t)$ pour les petites valeurs de Δt par

$$U_{ij}(t, \Delta t) = \delta_{ij} + \frac{i}{\hbar} H_{ij}(t)\, \Delta t. \tag{12.6}$$

L'utilisation de cette forme est justifiée par le fait que pour $\Delta t \to 0$ les coefficients U_{ij} doivent se réduire à δ_{ij} (δ_{ij} est le symbole de

Kronecker). En portant (12.6) dans (12.5), on obtient

$$-i\hbar \frac{C_i(t+\Delta t)-C_i(t)}{\Delta t}=\sum_j H_{ij}(t)\,C_j(t). \tag{12.7}$$

En passant à la limite pour $\Delta t \to 0$, on arrive à l'équation

$$-i\hbar \frac{d}{dt} C_i(t)=\sum_j H_{ij}(t)\,C_j(t). \tag{12.8}$$

C'est là l'équation fondamentale de la mécanique quantique exprimant le principe de causalité. H_{ij} est une matrice caractérisant le contenu physique du problème à l'étude.

La matrice de Hamilton. La matrice H_{ij} est connue sous le nom de *matrice de Hamilton*. On doit faire à son sujet les remarques suivantes :

1) La dépendance temporelle de la matrice de Hamilton exprime la dépendance temporelle des conditions physiques (par exemple, la microparticule se trouve soumise à l'action d'un champ magnétique variant dans le temps). Mais si les conditions restent invariables, la matrice ne dépend pas du temps.

2) Dans le cas où la matrice de Hamilton est *diagonalisée* (seuls ses éléments diagonaux sont différents de zéro), les éléments de matrice ont une signification physique simple : ils représentent les valeurs possibles de l'énergie de la microparticule *. C'est pour cette raison que l'on pourrait appeler la matrice de Hamilton *matrice énergétique*.

3) Les éléments de la matrice de Hamilton satisfont à la relation

$$H_{ij}=H^*_{ji}. \tag{12.9}$$

La validité de cette relation tient à ce que la probabilité d'existence de la microparticule dans l'un des états de base (probabilité donnée par $\sum C_i C_i$ *) ne peut évidemment varier dans le temps. Pour le démontrer, nous partirons de l'égalité

$$\frac{d}{dt}\sum_i C_i C_i^*=0. \tag{12.10}$$

En remarquant que

$$\frac{d}{dt}\sum_i C_i C_i^*=\sum_i \frac{dC_i}{dt}C_i^*+\sum_i C_i\frac{dC_i^*}{dt},$$

et en utilisant (12.8), l'égalité (12.10) se laisse écrire sous la forme suivante

$$\sum_i\sum_j (H_{ij}-H^*_{ji})\,C_j C_i^*=0, \tag{12.11}$$

d'où l'on tire aussitôt (12.9).

* On trouvera la justification de cette propriété au § 13.

Notons encore que de l'égalité (12.9) on infère que les éléments diagonaux de la matrice de Hamilton sont réels. Cette conclusion concorde avec le fait cité ci-dessus que les éléments diagonaux caractérisent l'énergie de la microparticule.

Que doit-on faire pour appliquer le principe de causalité aux phénomènes décrits par la théorie quantique? On trouve une réponse à cette question en partant de l'équation fondamentale de la mécanique quantique (12.8). On commencera par choisir un ensemble d'états de base $\{\langle i\,|\}$, puis on doit déterminer la forme de la matrice de Hamilton correspondant à ce système d'états de base. On peut alors à l'aide de (12.8) faire des prévisions valables.

Sont particulièrement faciles à traiter les cas où il n'y a que *deux* états de base. On simplifie encore plus le problème en supposant que la matrice de Hamilton ne dépend pas du temps. Aux paragraphes 13 et 14 nous donnerons des exemples concrets d'utilisation de l'équation (12.8) qui se trouve à la base de toute description causale des microphénomènes.

§ 13. Microparticules ne disposant que de deux états de base

Exemples de microparticules à deux états de base. En général le nombre d'états de base d'une microparticule est supérieur à deux. Cependant il existe des situations où on peut se contenter de ne prendre en considération que deux états de base. A titre d'exemple familier au lecteur nous indiquerons le passage d'un photon à travers un polariseur. Le photon se trouve dans un état caractérisé par une impulsion déterminée $\hbar\vec{k}$ (et une énergie déterminée $\hbar\vec{k}c$); dans ce cas on n'a à considérer que les changements de la polarisation du photon, ce qui nous permet de ne considérer que deux états de base se distinguant par leurs polarisations.

Ainsi, chaque fois qu'il s'agit d'une microparticule ne possédant que deux états de base, on admet que l'on ne doit prendre en considération que les variations d'un seul « paramètre » de la microparticule (par exemple, de sa polarisation), ses autres paramètres étant supposés donnés. Donnons quelques exemples de cas où on peut dire que la microparticule ne possède que deux états de base. Nous désignerons ces états par les symboles $\langle 1\,|$ et $\langle 2\,|$.

La *molécule d'ammoniac* comporte un atome d'azote et trois atomes d'hydrogène, l'atome d'azote se trouvant en dehors du plan passant par les trois atomes d'hydrogène (nous appellerons ce plan le plan H). L'état $\langle 1\,|$ correspond à la position de l'atome d'azote d'un côté de ce plan et l'état $\langle 2\,|$ à celle où l'atome d'azote se trouve de l'autre côté du plan H.

La *molécule d'hydrogène* comporte deux protons et deux électrons dont les états de spin sont différents. Fixons mentalement un de ces

états de spin. On définira alors l'état de base $\langle 1 \mid$ comme celui où l'électron de ce spin se trouve localisé à proximité de l'un des protons, et l'état de base $\langle 2 \mid$ sera celui où ce même électron sera localisé à proximité du second proton. Dans ces conditions le deuxième électron sera chaque fois localisé à proximité du proton resté disponible (par suite de la grande répulsion coulombienne des électrons on n'a pas à envisager la possibilité de localisation des deux électrons à proximité d'un seul et même proton).

Rôle des éléments non diagonaux de la matrice de Hamilton. Nous pouvons représenter tout état arbitrairement choisi $\langle s \mid$ de la microparticule comme une superposition des états de base $\langle 1 \mid$ et $\langle 2 \mid$:

$$\langle s \mid = \langle s \mid 1 \rangle \langle 1 \mid + \langle s \mid 2 \rangle \langle 2 \mid,$$

ce qui s'écrit en tenant compte de (12.4)

$$\langle s \mid = C_1 \langle 1 \mid + C_2 \langle 2 \mid. \tag{13.1}$$

Les amplitudes C_1 et C_2 doivent, d'après (12.8), satisfaire au système d'équations:

$$\left.\begin{aligned} -i\hbar \frac{d}{dt} C_1 &= H_{11}C_1 + H_{12}C_2, \\ -i\hbar \frac{d}{dt} C_2 &= H_{21}C_1 + H_{22}C_2. \end{aligned}\right\} \tag{13.2}$$

Nous devons considérer deux cas.

Premier cas: les éléments non diagonaux H_{12} et H_{21} sont nuls (la matrice de Hamilton est diagonalisée). Le système d'équations (13.2) se scinde en deux équations mutuellement indépendantes:

$$-i\hbar \frac{d}{dt} C_1 = H_{11}C_1, \quad -i\hbar \frac{d}{dt} C_2 = H_{22}C_2, \tag{13.3}$$

Il s'ensuit de (13.3) que si, à un instant donné, la microparticule se trouve, par exemple, dans l'état $\langle 1 \mid$, elle ne se trouvera jamais dans l'état $\langle 2 \mid$. Les états de base $\langle 1 \mid$ et $\langle 2 \mid$ sont alors des *états stationnaires* de la microparticule, caractérisés par les valeurs H_{11} et H_{22} de l'énergie.

Deuxième cas: les éléments non diagonaux H_{12} et H_{21} sont différents de zéro. Nous avons alors à considérer le système (13.2) de deux équations mutuellement liées. Si donc à un instant donné la microparticule se trouve dans l'état $\langle 1 \mid$, à un autre instant elle peut se trouver dans l'état $\langle 2 \mid$. La présence dans la matrice de Hamilton d'éléments non diagonaux marque la possibilité de *transitions* de la microparticule entre ses différents états de base.

Appliquant ces considérations à nos exemples concrets de microparticules présentant deux états de base, nous noterons que dans la molécule d'ammoniac l'atome d'azote effectue des transitions en pas-

sant d'un côté à l'autre du plan H. Dans la molécule d'hydrogène les protons « échangent » leurs électrons. Notons que c'est précisément cet « échange » d'une paire d'électrons qui détermine l'existence de la *liaison chimique*. On dit qu'une liaison de valence s'établit entre deux atomes lorsque les électrons de chacun de ces atomes sont mis en commun. Ce sont ces électrons « collectivisés » qui sont responsables de l'existence de la liaison interatomique.

Un bref intermède

LECTEUR : Ci-dessus, au paragraphe 10, on affirmait : « si la microparticule se trouve dans un état de base, on ne peut la déceler dans un autre état de base ». N'y a-t-il pas contradiction entre cette affirmation et la possibilité évoquée tout à l'heure de ce que la microparticule effectue des transitions entre différents états de base ?
AUTEUR : Au paragraphe 10 il s'agissait du principe de superposition des états et on n'a pas alors tenu compte des transitions évoluant dans le temps entre les états dont on considérait la superposition.
LECTEUR : Je voudrais que vous m'expliquiez cela.
AUTEUR : Commençons par transcrire la formule (13.1) sous la forme

$$\langle s(t)| = C_1(t)\langle 1| + C_2(t)\langle 2|. \qquad (13.1a)$$

Nous nous trouvons en présence d'une microparticule se trouvant dans un état de superposition $\langle s(t)|$. Si à l'instant t le détecteur se trouve déclenché, on décèle la microparticule soit dans l'état $\langle 1|$, soit dans l'état $\langle 2|$; la probabilité d'occurrence de l'état $\langle 1|$ est $|C_1(t)|^2$ et celle de l'état $\langle 2|$ est $|C_2(t)|^2$. Il est essentiel de noter que ces deux événements excluent l'un l'autre et c'est ce que sous-entend la proposition que vous venez de citer.
LECTEUR : J'ai compris de quoi il s'agit. Si à un instant t la microparticule est décelée dans l'état $\langle 1|$, on ne peut la déceler au même instant dans l'état $\langle 2|$. Cependant, à un autre instant, la microparticule peut être décelée dans l'état $\langle 2|$.
AUTEUR : Ce qui importe surtout c'est que les éléments non diagonaux de la matrice de Hamilton soient non nuls. S'il n'en est pas ainsi, une microparticule détectée dans l'état $\langle 1|$ ne pourra être détectée dans l'état $\langle 2|$ ni à cet instant-là, ni à aucun autre instant.
LECTEUR : Si j'ai bien compris la corrélation de superposition et les transitions entre états de base sont des notions différentes.
AUTEUR : Bien sûr, mais il ne faut pas oublier que lorsqu'il s'agit de transitions on doit tenir compte non seulement du caractère non diagonal de la matrice de Hamilton, mais encore de la corrélation de superposition (13.1a). Tout dépend alors de la dépendance avec le temps des amplitudes C_1 et C_2. Dans un cas $|C_1|^2$ sont indépendantes du temps et alors il n'y a pas de transitions entre les états de base. Dans le cas où $|C_1|^2$ et $|C_2|^2$ varient dans le temps, les transitions ont lieu. Mais la question de la dépendance avec le temps des amplitudes C_1 et C_2 nécessite une étude plus approfondie.

Variation dans le temps des amplitudes d'états. Pour bien mettre en évidence la variation des amplitudes C_1 et C_2 avec le temps, nous considérerons deux cas.

Premier cas : les éléments non diagonaux de la matrice de Hamilton sont nuls. Par résolution de l'équation (13.3) on trouve

$$C_1(t) = C_1(0)\exp(iH_{11}t/\hbar), \quad C_2(t) = C_2(0)\exp(iH_{22}t/\hbar). \qquad (13.4)$$

Cette solution exprime la dépendance avec le temps des amplitudes caractérisant les états stationnaires.

Il s'ensuit de (13.4) que les probabilités de déceler la microparticule dans l'un des états de base ne dépendent pas du temps

$$| C_1 (t) |^2 = | C_1 (0) |^2, \quad | C_2 (t) |^2 = | C_2 (0) |^2. \tag{13.5}$$

Si à l'instant $t = 0$ la microparticule se trouve dans l'état $\langle 1 |$, on a $| C_1 (t) |^2 = 1$ et $| C_2 (t) |^2 = 0$. Comme on pouvait s'y attendre, le temps de vie d'une microparticule se trouvant dans un état stationnaire est indéfiniment grand.

Deuxième cas: les éléments non diagonaux de la matrice de Hamilton sont différents de zéro. Admettons qu'il soit possible de poser *

$$H_{11} = H_{22} \equiv E_0. \tag{13.6}$$

Nous admettrons encore que les éléments non diagonaux de la matrice de Hamilton sont réels et, tenant compte de (12.9), nous utiliserons la notation

$$H_{12} = H_{21} \equiv -A. \tag{13.7}$$

A l'aide de (13.6) et (13.7) nous pouvons mettre (13.2) sous la forme suivante

$$\left.\begin{aligned} -i\hbar \frac{d}{dt} C_1 &= E_0 C_1 - A C_2, \\ -i\hbar \frac{d}{dt} C_2 &= E_0 C_2 - A C_1. \end{aligned}\right\} \tag{13.8}$$

Ce système d'équations est équivalent au système

$$\left.\begin{aligned} -i\hbar \frac{d}{dt} (C_1 + C_2) &= (E_0 - A)(C_1 + C_2), \\ -i\hbar \frac{d}{dt} (C_1 - C_2) &= (E_0 + A)(C_1 - C_2). \end{aligned}\right\}$$

Les solutions de ce dernier système sont de la forme

$$C_1 + C_2 = a \exp [i (E_0 - A) t/\hbar];$$
$$C_1 - C_2 = b \exp [i (E_0 + A) t/\hbar].$$

On en tire

$$C_1 (t) = \frac{a}{2} \exp [i (E_0 - A) t/\hbar] + \frac{b}{2} \exp [i (E_0 + A) t/\hbar], \tag{13.9a}$$

$$C_2 (t) = \frac{a}{2} \exp [i (E_0 - A) t/\hbar] - \frac{b}{2} \exp [i (E_0 + A) t/\hbar]. \tag{13.9b}$$

* On peut le faire chaque fois que le problème considéré implique une certaine symétrie: dans le cas de la molécule d'ammoniac les états $\langle 1 |$ et $\langle 2 |$ correspondent à des positions de l'atome d'azote qui sont symétriques par rapport au plan H.

Supposons qu'à l'instant $t = 0$ la microparticule se trouve dans l'état $\langle 1 |$; on a alors $C_1(0) = 1$ et $C_2(0) = 0$ et il en découle que $a = b = 1$. Dans ce cas les équations (13.9) s'écrivent

$$C_1(t) = \exp(iE_0t/\hbar)\cos(At/\hbar), \tag{13.10a}$$

$$C_2(t) = -i\exp(iE_0t/\hbar)\sin(At/\hbar). \tag{13.10b}$$

Il résulte de ces formules que la probabilité de ce que la microparticule se trouve toujours dans l'état $\langle 1 |$ à l'instant t est égale à :

$$|C_1(t)|^2 = \cos^2(At/\hbar), \tag{13.11a}$$

tandis que la probabilité de ce qu'à l'instant t elle se trouve dans l'état $\langle 2 |$ est

$$|C_2(t)|^2 = \sin^2(At/\hbar). \tag{13.11b}$$

Il est instructif de comparer (13.5) et (13.11). Dans le premier cas les probabilités $|C_1|^2$ et $|C_2|^2$ sont indépendantes du temps, tandis que dans le second cas elles dépendent explicitement du temps. La fig. 13.1 représente la dépendance avec le temps des probabilités $|C_1(t)|^2$ et $|C_2(t)|^2$ données par les formules (13.11).

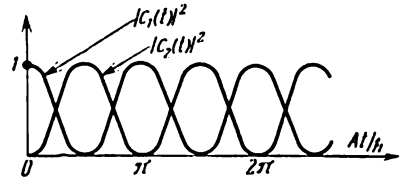


Fig. 13.1

Diagonalisation de la matrice de Hamilton. Comparons les formules exprimant $C_1 + C_2$ et $C_1 - C_2$ que nous venons d'obtenir au paragraphe précédent avec la formule (13.14). On peut en conclure que les amplitudes $C_1 + C_2$ et $C_1 - C_2$ décrivent les états stationnaires de la microparticule dont les énergies sont respectivement égales à $E_0 - A$ et $E_0 + A$. Introduisons maintenant deux nouveaux états de base :

$$\begin{aligned} \langle \mathrm{I} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle 1 | - \langle 2 |), \\ \langle \mathrm{II} | &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle 1 | + \langle 2 |) \end{aligned} \tag{13.12}$$

(il est facile de s'assurer que si les états $\langle 1 |$ et $\langle 2 |$ satisfont à la condition d'orthonormation (10.8), les états $\langle \mathrm{I} |$ et $\langle \mathrm{II} |$ y satisfont également). En utilisant (13.2), transcrivons (13.1) sous la forme

$$\langle s | = \frac{C_1 - C_2}{\sqrt{2}}\langle \mathrm{I} | + \frac{C_1 + C_2}{\sqrt{2}}\langle \mathrm{II} |. \tag{13.13}$$

Cette expression montre que lorsqu'on passe des états $\langle 1 |$ et $\langle 2 |$ aux états de base $\langle \mathrm{I} |$ et $\langle \mathrm{II} |$, on passe des amplitudes C_1 et C_2 aux amplitudes $(C_1 - C_2)/\sqrt{2}$ et $(C_1 + C_2)/\sqrt{2}$. Or puisque ces dernières

amplitudes décrivent des états stationnaires de la microparticule, le passage des premiers états de base aux seconds implique une diagonalisation de la matrice de Hamilton

$$\begin{bmatrix} E_0 & -A \\ -A & E_0 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} E_0+A & 0 \\ 0 & E_0-A \end{bmatrix}.$$

Considérons une microparticule se trouvant dans des conditions ambiantes données. On choisit un certain système d'états de base, qui doit avoir une signification physique concrète (comme dans les cas de la molécule d'ammoniac ou de la molécule d'hydrogène). Les états de base qui ont été choisis dans cet esprit se caractérisent généralement par une matrice de Hamilton dont les éléments non diagonaux ne sont pas nuls (cela implique des transitions entre les états de base). On peut alors passer à un autre système d'états de base dont la matrice de Hamilton sera diagonale. Ces nouveaux états de base décrivent les états stationnaires de la microparticule; les éléments de la matrice de Hamilton diagonalisée représentent les valeurs de l'énergie de ces états stationnaires.

Etude du cas général. Dans le cas le plus général les éléments non diagonaux de la matrice de Hamilton sont différents de zéro, de sorte que les hypothèses simplificatrices (13.6) et (13.7) cessent d'être valables. On doit alors résoudre non le système d'équations simplifiées (13.8), mais le système d'équations général (13.2) décrivant une microparticule disposant de deux états de base. Nous laisserons au lecteur le soin de résoudre le système (13.2) en supposant, pour simplifier, que la matrice de Hamilton est indépendante du temps *. Quant à nous, nous nous contenterons d'indiquer certaines conclusions qui en découlent.

L'énergie des états stationnaires de la microparticule est donnée par la formule

$$E_{\mathrm{I,\,II}} = \frac{H_{11}+H_{22}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{H_{11}-H_{22}}{2}\right)^2 + H_{12}H_{21}}. \qquad (13.14)$$

A ces valeurs de l'énergie correspondent les états de base $\langle \mathrm{I}\,|$ et $\langle \mathrm{II}\,|$ qui se laissent définir par les états de base $\langle 1\,|$ et $\langle 2\,|$ utilisés pour décrire le système (13.2) de la manière suivante

$$\left.\begin{aligned} \langle \mathrm{I}\,| &= a_1\langle 1\,| + b_1\langle 2\,|, \\ \langle \mathrm{II}\,| &= a_2\langle 1\,| + b_2\langle 2\,|, \end{aligned}\right\} \qquad (13.15)$$

avec

$$\left.\begin{aligned} &|a_1|^2+|b_1|^2=|a_2|^2+|b_2|^2=1, \\ &a_1/b_1 = H_{12}/(E-H_{11}), \\ &a_2/b_2 = H_{21}/(E_{\mathrm{II}}-H_{22}), \end{aligned}\right\} \qquad (13.16)$$

* On trouvera la solution de ce problème dans [3].

Il est facile de voir que si $H_{11} = H_{22} = E_0$ et $H_{12} = H_{21} = -A$, on tire de (13.14) $E_{\mathrm{I,II}} = E_0 \pm A$, et les superpositions (13.15) se ramènent à (13.12). Autrement dit, on en revient au cas simplifié d'une matrice non diagonalisée. Dans le cas où $H_{12} = H_{21} = 0$ la formule (13.14) fournit $E_{\mathrm{I}} = H_{11}$ et $E_{\mathrm{II}} = H_{22}$, qui est le cas d'une matrice de Hamilton diagonalisée ($\langle \mathrm{I} \mid = \langle 1 \mid$, $\langle \mathrm{II} \mid = \langle 2 \mid$).

Cas de la molécule d'ammoniac. Rappelons que pour la molécule d'ammoniac on choisit les états de base en partant de considérations concrètes relatives aux deux positions possibles de l'atome d'azote de part et d'autre du plan H. Étant donné que ces deux positions sont symétriques par rapport au plan H, on peut poser $H_{11} = H_{22} \equiv E_0$. En admettant d'autre part que les éléments H_{12} et H_{21} sont réels ($H_{12} = H_{21} \equiv -A$), ce qui n'affecte nullement la généralité des résultats, nous arrivons au cas décrit par le système d'équations simplifiées (13.8). Il en résulte que les niveaux d'énergie de la molécule sont $E_0 + A$ et $E_0 - A$. Remarquons que s'il n'y avait pas de transitions entre les états $\langle 1 \mid$ et $\langle 2 \mid$, au lieu des deux niveaux $E_0 + A$ et $E_0 - A$ on aurait à considérer un seul niveau E_0. Ce niveau aurait été deux fois dégénéré, puisqu'il aurait été commun à deux états différents. On peut dire que l'existence de transitions entre les états $\langle 1 \mid$ et $\langle 2 \mid$ (se traduisant par le passage de l'atome d'azote au travers du plan H) conduit à lever la dégénérescence et à dédoubler le niveau E_0 en deux niveaux $E_0 + A$ et $E_0 - A$.

Supposons maintenant que la molécule d'ammoniac est soumise à l'action d'un champ électrique continu, d'intensité $\mathscr{E}$ dirigée suivant la normale au plan H. En désignant par d le moment dipolaire de la molécule, on a

$$H_{11} = E_0 + \mathscr{E}d, \quad H_{22} = E_0 - \mathscr{E}d. \tag{13.17}$$

Dans ces conditions les deux positions de l'atome d'azote par rapport au plan H ne sont plus symétriques ($H_{11} \neq H_{22}$). En posant $H_{12} = H_{21} = -A$, le système d'équations (13.2) s'écrit pour le cas considéré

$$\left.\begin{aligned} -i\hbar \frac{d}{dt} C_1 &= (E_0 + \mathscr{E}d)\, C_1 - AC_2, \\ -i\hbar \frac{d}{dt} C_2 &= -AC_1 + (E_0 - \mathscr{E}d)\, C_2. \end{aligned}\right\} \tag{13.18}$$

A l'aide de (13.14) on arrive aux formules suivantes pour les niveaux d énergie de la molécule placée dans un champ électrique statique

$$E_{\mathrm{I}} = E_0 + \sqrt{A^2 + \mathscr{E}^2 d^2}, \quad E_{\mathrm{II}} = E_0 - \sqrt{A^2 + \mathscr{E}^2 d^2}, \tag{13.19}$$

La fig. (13.2) illustre l'allure de la variation de la position des niveaux d'énergie de la molécule d'ammoniac en fonction de l'intensité

du champ appliqué. Il est facile de voir que l'effet de transfert de l'atome d'azote d'un côté à l'autre du plan H n'a d'importance que tant que le champ appliqué est faible; lorsque l'intensité du champ appliqué devient grande, cet effet devient insignifiant.

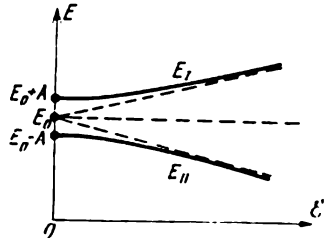


Fig. 13.2.

§ 14. Comportement de l'électron dans un champ magnétique

On sait que la projection du moment du spin électronique sur une direction arbitraire ne peut prendre que deux valeurs ($-\hbar/2$) et $\hbar/2$). Cela permet de considérer l'électron comme une microparticule disposant de deux états de base. L'étude du comportement de l'électron en présence d'un champ magnétique appliqué présente un grand intérêt pratique. D'autre part, cette étude est instructive sous l'aspect de la méthodologie, puisqu'elle permet de bien comprendre le caractère général des systèmes disposant de deux états de base, donc de deux niveaux d'énergie; l'étude d'un système concret permet de préciser l'approche utilisée pour l'étude de ce type de problèmes.

Matrice de Hamilton d'un électron placé dans un champ magnétique. Fixons les orientations des axes de coordonnées (notamment celle de l'axe z). En qualité des états de base $\langle 1 \mid$ et $\langle 2 \mid$ nous prendrons les états pour lesquels les projections du spin électronique sur l'axe z sont égales à $\hbar/2$ et $-\hbar/2$. Appliquons un champ magnétique continu (d'induction B) et considérons les deux cas suivants.

Premier cas: le champ magnétique est parallèle à l'axe z ($B_x = B_y = 0$). Les états de base $\langle 1 \mid$ et $\langle 2 \mid$ sont alors des états stationnaires; à l'état $\langle 1 \mid$ correspond une énergie $-\mu B_z$ et à l'état $\langle 2 \mid$ l'énergie μB_z (μ désigne le moment magnétique de l'électron). Les amplitudes C_1 et C_2 satisfont à deux équations mutuellement indépendantes telles que (13.3):

$$-i\hbar \frac{dC_1}{dt} = -\mu B_z C_1, \quad -i\hbar \frac{dC_2}{dt} = \mu B_z C_2. \tag{14.1}$$

La matrice de Hamilton pour l'électron est alors de la forme

$$[H] = \begin{bmatrix} -\mu B_z & 0 \\ 0 & \mu B_z \end{bmatrix}. \tag{14.2}$$

Deuxième cas: la direction du champ magnétique est arbitraire. Remarquons d'abord qu'indépendamment de la direction du champ (donc indépendamment de l'orientation des axes de coordonnées) les niveaux énergétiques de l'électron sont toujours définis par $-\mu B$

et μB. Si dans le premier cas nous avons posé $B = B_z$, maintenant nous poserons $B = (B_x^2 + B_y^2 + B_z^2)^{1/2}$. Par suite

$$E_{\mathrm{I}} = -\mu\sqrt{B_x^2+B_y^2+B_z^2},\quad E_{\mathrm{II}} = \mu\sqrt{B_x^2+B_y^2+B_z^2}, \tag{14.3}$$

On notera que

$$E_{\mathrm{I}} = -E_{\mathrm{II}}. \tag{14.4}$$

Utilisons maintenant l'équation (13.14). Compte tenu de (14.4), on peut poser $H_{11} + H_{22} = 0$. A l'aide de (14.3) et de (12.9) nous obtenons

$$\left(\frac{H_{11}-H_{22}}{2}\right)^2 + |H_{12}|^2 = \mu^2(B_x^2+B_y^2+B_z^2). \tag{14.5}$$

Nous supposerons que les éléments de la matrice de Hamilton sont linéaires par rapport au champ. Il s'avère que cette hypothèse, somme toute assez naturelle, suffit pour passer de (14.5) aux égalités suivantes : $H_{11} = -\mu B_z$; $H_{22} = \mu B_z$; $H_{21} = H_{12}^* = -\mu(B_x + iB_y)$. Par suite, la matrice de Hamilton pour un électron soumis à l'action d'un champ magnétique se présente dans le cas général sous la forme suivante

$$[H] = \begin{bmatrix} -\mu B_z & -\mu(B_x - iB_y) \\ -\mu(B_x + iB_y) & \mu B_z \end{bmatrix}. \tag{14.6}$$

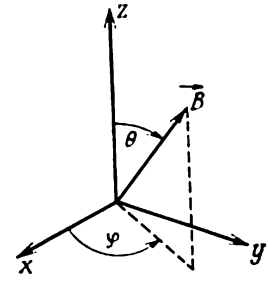


Fig. 14.1.

Il est facile de voir que lorsque $B_x = B_y = 0$ la matrice (14.6) se réduit, comme il fallait s'y attendre, à la matrice (14.2).

Utilisant (14.6), transcrivons le système (13.2) pour le cas à l'étude

$$\left.\begin{aligned} -i\hbar\frac{d}{dt}C_1 &= -\mu[B_zC_1 + (B_x - iB_y)C_2], \\ -i\hbar\frac{d}{dt}C_2 &= -\mu[(B_x + iB_y)C_1 - B_zC_2]. \end{aligned}\right\} \tag{14.7}$$

Remarquons pour conclure que bien que toutes les considérations aient été développées pour le cas où la matrice était indépendante du temps, les résultats (14.6) et (14.7) restent valables lorsque le champ magnétique varie dans le temps.

Les amplitudes des projections de spin. Supposons que la direction du champ magnétique soit définie par l'angle polaire θ et l'angle azimutal φ (fig. 14.1) et que le spin de l'électron soit orienté le long de ce champ ; on en conclut que l'électron se trouve dans l'état stationnaire $\langle \mathrm{I} \mid$ d'une énergie $E_{\mathrm{I}} = -\mu B$. Représentons, conformément à (13.15), l'état $\langle \mathrm{I} \mid$ sous la forme de la superposition

$$\langle \mathrm{I} \mid = a_1 \langle 1 \mid + b_1 \langle 2 \mid, \tag{14.8}$$

où $\langle 1 \mid$ et $\langle 2 \mid$ sont les états pour lesquels les projections du spin électronique sur l'axe z sont respectivement égales à $\hbar/2$ et $-\hbar/2$, tandis que les coefficients a_1 et b_1 sont définis par les relations (13.16) :

$$a_1/b_1 = H_{12}/(E_I - H_{11}), \quad |a_1|^2 + |b_1|^2 = 1. \tag{14.9}$$

Utilisant (14.6), on écrira :

$$\left.\begin{aligned} H_{11} &= -\mu B_z = -\mu B \cos\theta, \\ H_{12} &= -\mu (B_x - iB_y) = -\mu B \sin\theta \exp(-i\varphi). \end{aligned}\right\} \tag{14.10}$$

En portant (14.10) dans (14.9), on obtient

$$a_1/b_1 = \sin\theta \exp(-i\varphi)/(1 - \cos\theta).$$

En remarquant que $|a_1|^2 + |b_2|^2 = 1$, on arrive aux résultats suivants

$$\begin{aligned} a_1 &= \cos(\theta/2) \exp(-i\varphi/2); \\ b_1 &= \sin(\theta/2) \exp(i\varphi/2). \end{aligned} \tag{14.11}$$

Nous avons déterminé ainsi les amplitudes de la probabilité pour que le spin de l'électron soit orienté suivant l'axe z (amplitude a_1) ou en sens contraire (amplitude b_1), le spin de l'électron étant orienté le long du champ appliqué (sa direction est donc définie par les angles θ et φ).

Il est remarquable que l'induction magnétique B ne figure pas dans (14.11), aussi cette formule doit-elle rester valable pour $B \to 0$. Par suite, on peut exclure de nos considérations la présence du champ magnétique et interpréter le résultat (14.11) de la manière suivante. Nous savons que la direction du spin électronique est définie par les angles θ et φ ; l'amplitude de la probabilité pour que le spin orienté le long de l'axe z soit alors égal à a_1, et l'amplitude de la probabilité pour que ce spin soit orienté en sens contraire est b_1. Nous devons considérer alors l'expression (14.8) comme le développement de l'état de spin $\langle \theta, \varphi \mid$ suivant les états de spin $\langle z \mid$ et $\langle -z \mid$:

$$\begin{aligned} \langle \theta, \varphi \mid = \cos(\theta/2) \exp(-i\varphi/2) \langle z \mid + \\ + \sin(\theta/2) \exp(i\varphi/2) \langle -z \mid. \end{aligned} \tag{14.12}$$

Les amplitudes d'états figurant dans (14.12)

$$\begin{aligned} \langle \theta, \varphi \mid z \rangle &= \cos(\theta/2) \exp(-i\varphi/2); \\ \langle \theta, \varphi \mid -z \rangle &= \sin(\theta/2) \exp(i\varphi/2) \end{aligned} \tag{14.13}$$

sont appelées les *amplitudes de projection*.

La mise en œuvre des amplitudes de projection permet de prédéterminer le résultat de l'expérience suivante. Soit un pinceau d'électrons polarisé le long d'une direction définie par les angles θ et φ ; ce pinceau d'électrons est dirigé vers un « filtre » qui ne laisse passer que les électrons dont le spin est orienté le long de l'axe z. L'ampli-

tude de probabilité pour le passage d'un électron à travers ce « filtre » est $\langle\theta, \varphi \mid z\rangle$. L'amplitude de projection assume ici le même rôle que l'amplitude de transition d'un état $\langle\theta, \varphi \mid$ à un état $\langle z \mid$.

Précession du spin électronique. Posons que la direction du spin électronique est définie par les angles θ et φ (l'électron se trouve dans l'état $\langle\theta, \varphi \mid$). Cet état peut être représenté par une superposition des états $\langle z \mid$ et $\langle -z \mid$ (14.12). Supposons qu'à l'instant $t = 0$ on applique un champ magnétique B orienté le long de l'axe z. Les états $\langle z \mid$ et $\langle -z \mid$ deviennent alors des états stationnaires, ce qui nous permet d'écrire [cf. (13.4)] :

$$\begin{aligned} \langle\theta, \varphi \mid z\rangle &= C_1(0) \exp(-i\mu B_z t/\hbar), \\ \langle\theta, \varphi \mid -z\rangle &= C_2(0) \exp(i\mu B_z t/\hbar). \end{aligned} \tag{14.14}$$

En identifiant membre par membre (14.14) et (14.13), on trouve

$$\begin{aligned} C_1(0) &= \cos(\theta/2) \exp(-i\varphi/2); \\ C_2(0) &= \sin(\theta/2) \exp(i\varphi/2). \end{aligned} \tag{14.15}$$

Il en résulte qu'au bout d'un temps t après l'application du champ magnétique les amplitudes de projection seront données par

$$\begin{aligned} \langle\theta, \varphi(t) \mid z\rangle &= \cos(\theta/2) \exp\left[-\frac{i}{2}(\varphi + 2\mu B_z t/\hbar)\right], \\ \langle\theta, \varphi(t) \mid -z\rangle &= \sin(\theta/2) \exp\left[\frac{i}{2}(\varphi + 2\mu B_z t/\hbar)\right]. \end{aligned} \tag{14.16}$$

Cela montre que l'application d'un champ magnétique dirigé suivant l'axe z ne modifie pas l'angle polaire θ, mais fait varier l'angle azimutal φ, la variation de cet angle étant proportionnelle à l'intervalle de temps t écoulé entre l'instant où le champ a été appliqué et l'instant considéré. Cela signifie que le spin de l'électron effectue une *précession* autour de l'axe z (donc autour de la direction du champ magnétique) à une vitesse angulaire constante. Il est facile de montrer que la vitesse de précession du spin est donnée par

$$\omega = 2\mu B_z/\hbar. \tag{14.17}$$

Faisons un pas de plus et supprimons les axes de coordonnées. Posons qu'à l'instant $t = 0$ la direction du spin électronique forme un angle θ avec la direction du champ magnétique. Cet angle reste invariable dans le temps, mais le spin de l'électron effectue un mouvement de précession autour de la direction du champ magnétique avec une vitesse angulaire

$$\omega = 2\mu B/\hbar. \tag{14.17a}$$

Supposons que le champ magnétique varie dans le temps (sont variables aussi bien la direction que le module du vecteur $\vec{B}$). La variation du champ entraîne la modification du mode de précession du spin

électronique : la variation de l'induction magnétique s'accompagne d'une variation de la vitesse angulaire de précession, tandis que la variation de la direction du champ magnétique fait varier la direction autour de laquelle s'effectue la précession.

Connaissant l'évolution de la précession, on peut prédéterminer les changements de l'état de l'électron durant un intervalle de temps donné. Considérons un exemple (fig. 14.2). Supposons qu'à l'instant $t = 0$ le champ soit dirigé le long de l'axe z [vecteur $\vec{B}$ (0)], et le spin de l'électron se trouve dans le plan zy, formant avec la direction du champ un angle θ_0. Dans ces conditions l'état initial de l'électron $\langle\theta\ (0), \varphi\ (0)\ |$ est déterminé par les angles $\theta\ (0) = \theta_0$ et $\varphi\ (0) = \pi/2$. Admettons que l'intensité du champ magnétique est constante, mais que sa direction varie dans le temps. Posons qu'au bout d'un temps $t_1 = \pi\hbar/2\mu B$ le champ soit dirigé le long de l'axe y [vecteur $\vec{B}\ (t_1)$ sur la fig. 14.2]. Dans quel état se trouvera l'électron à l'instant t_1? Il est évident que si la direction du champ n'avait pas varié, l'extrémité du vecteur spin électronique aurait décrit dans son mouvement de précession pendant le temps $\pi\hbar/2\mu B$ un demi-cercle et se serait donc déplacée du point s_1 au point s_2. Mais la direction du champ étant variable, l'extrémité de ce vecteur se déplace non pas vers le point s_2, mais vers un point s_3. Par suite, l'état de l'électron $\langle\theta\ (t_1), \varphi\ (t_1)\ |$ sera défini par les angles $\theta\ (t_1) = \pi/2 - \theta_0$ et $\varphi\ (t_1) = \pi/2$.

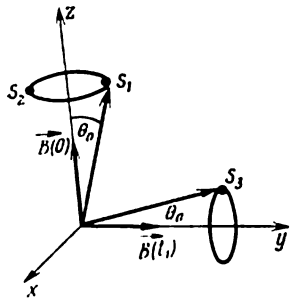


Fig. 14.2.

Généralisation du problème de l'électron soumis à l'action d'un champ magnétique à des systèmes à deux niveaux arbitraires. Feynman écrivait [3] : « *en établissant une analogie mathématique avec un électron en rotation, on peut, utilisant des raisonnements purement géométriques, résoudre n'importe quel problème relatif à un système à deux niveaux d'énergie ... Si nous sommes en mesure de résoudre le problème le plus général qui soit concernant l'électron, nous pouvons considérer que nous avons déjà résolu tous les problèmes imaginables, concernant les systèmes à deux états* ». Donnons une interprétation de ces considérations de Feynman.

Supposons que nous étudions un système à deux états de base $\langle 1\ |$ et $\langle 2\ |$. Convenons d'associer un vecteur à chacun des états de la microparticule. Dans ces conditions le choix des états de base $\langle 1\ |$ et $\langle 2\ |$ est équivalent au choix de l'axe z (tout se passe comme si ces états correspondaient à deux projections du spin de l'électron sur l'axe z). Supposons qu'à l'instant initial la microparticule se trouve dans l'état $\langle s\ (0)\ |$; associons à cet état un vecteur dont la direction

est déterminée par les angles θ (0) et φ (0):

$$\langle s\,(0)| \longleftrightarrow \langle \theta\,(0),\ \varphi\,(0)\,|. \tag{14.18}$$

Pour déterminer les angles θ (0) et φ (0) on doit décomposer l'état $\langle s\,(0)\,|$ en états de base $\langle 1\,|$ et $\langle 2\,|$ en utilisant pour la détermination des coefficients de cette décomposition la formule (14.13) définissant les amplitudes de projection. Cette décomposition est de la forme

$$\langle s\,(0)\,| = \cos\,[\theta\,(0)/2]\,\exp\,[-i\varphi\,(0)/2]\,\langle 1\,| + \\ + \sin\,[\theta\,(0)/2]\,\exp\,[i\varphi\,(0)/2]\,\langle 2\,|. \tag{14.19}$$

Utilisons maintenant la matrice de Hamilton de la microparticule. Déplaçons l'origine des énergies de telle sorte que le zéro de l'énergie se trouve exactement à mi-chemin entre les deux niveaux d'énergie, ce qui revient à satisfaire à la condition (14.4). Dans ces conditions on a

$$H_{11} + H_{22} = 0. \tag{14.20}$$

Introduisons tout formellement d'ailleurs le vecteur $\mu\vec{B}$ (ce vecteur n'est nullement lié à un quelconque champ magnétique!) qui doit être tel que ses projections sur les axes de coordonnées (notons que ces axes sont déterminés par le choix des états de base) satisfassent aux relations suivantes:

$$H_{11} = -\mu B_z,\ H_{12} = -\mu\,(B_x - iB_y). \tag{14.21}$$

On en tire

$$\omega = 2\mu\,(B_x^2 + B_y^2 + B_z^2)^{1/2}/\hbar. \tag{14.22}$$

Pour résoudre ce problème à deux niveaux, c'est-à-dire pour mettre en évidence le changement de l'état $\langle s\,|$ durant le temps t, on doit considérer la précession du vecteur $\langle \theta,\ \varphi\,|$ autour de la direction $\vec{B}$ à la vitesse angulaire ω. Si la matrice de Hamilton dépend du temps, on notera simultanément une variation de la direction de $\vec{B}$ et celle de la vitesse angulaire de précession. Au bout du temps t la microparticule se trouvera dans l'état $\langle s\,(t)\,|$ défini par les angles $\theta\,(t)$ et $\varphi\,(t)$ que l'on peut calculer connaissant les angles initiaux θ (0) et φ (0) ainsi que les caractéristiques du mouvement de précession (exactement de la même manière que nous l'avons fait à la fin du paragraphe précédent). Pour passer des angles $\theta\,(t)$ et $\varphi\,(t)$ à l'état final $\langle s\,(t)\,|$ que l'on cherche à déterminer, on utilise la superposition que le lecteur connaît déjà bien:

$$\langle s\,(t)\,| = \cos\,[\theta\,(t)/2]\,\exp\,[-i\varphi\,(t)/2]\,\langle 1\,| + \\ + \sin\,[\theta\,(t)/2]\,\exp\,[i\varphi\,(t)/2]\,\langle 2\,|. \tag{14.23}$$

En appliquant les remarques que nous avons faites au paragraphe 13 à l'occasion de l'étude de la molécule d'ammoniac, on doit dé-

placer l'origine des énergies de E_0 et passer (pour raison de commodité) des états $\langle 1 \mid$ et $\langle 2 \mid$ aux états $\langle \mathrm{I} \mid$ et $\langle \mathrm{II} \mid$. En définitive au lieu du système (13.18) on aura le système

$$\left.\begin{aligned} -i\hbar \frac{d}{dt} C_{\mathrm{I}} &= AC_{\mathrm{I}} + \mathcal{E}dC_{\mathrm{II}}, \\ -i\hbar \frac{d}{dt} C_{\mathrm{II}} &= \mathcal{E}dC_{\mathrm{I}} - AC_{\mathrm{II}}. \end{aligned}\right\} \tag{14.24}$$

Ce dernier système est d'un emploi commode pour établir des analogies avec le comportement de l'électron en présence d'un champ magnétique. En identifiant terme à terme (14.24) et (14.7), on constate que la quantité A correspond à $-\mu B_z$, la quantité $\mathcal{E}d$ à la quantité $-\mu B_x$. Il s'ensuit que l'on doit considérer la précession du vecteur de l'état $\langle s \mid$ de la molécule dans un « champ magnétique » dont les composantes sont : une composante continue dirigée le long de l'axe z, qui est associée à l'effet de transfert de l'atome d'azote d'un côté à l'autre du plan H, et une deuxième composante dirigée le long de l'axe x qui est associée au champ électrique. Il est évident que cette dernière composante peut varier dans le temps.

Les matrices de spin de Pauli. Pour conclure ce paragraphe, mentionnons les *matrices de spins de Pauli* qui sont largement utilisées dans les études quantomécaniques des systèmes à deux niveaux. Ces matrices sont de la forme

$$\sigma^x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}; \ \sigma^y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}; \ \sigma^z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \tag{14.25}$$

A l'aide de ces matrices nous pouvons transcrire la formule (14.6) des éléments de la matrice de Hamilton pour un électron soumis à l'action d'un champ magnétique sous la forme suivante

$$\mathrm{H}_{ij} = -\mu\,(\sigma^x_{ij} B_x + \sigma^y_{ij} B_y + \sigma^z_{ij} B_z). \tag{14.26}$$

En considérant σ^x, σ^y, σ^z comme les composantes d'une matrice-vecteur $\vec{\sigma}$, on peut mettre (14.26) sous une forme indépendante du choix des axes de coordonnées

$$H_{ij} = -\mu \vec{\sigma}_{ij} \vec{B}. \tag{14.27}$$

L'intérêt des matrices de Pauli réside en ce que toute matrice à deux rangs (en particulier, la matrice de Hamilton de toute microparticule à deux niveaux d'énergie) se laisse exprimer sous forme d'une superposition de matrices de Pauli. Après avoir été utilisées dans le problème de l'électron dans un champ magnétique, ces matrices se sont avérées d'un emploi commode pour l'étude de différents problèmes relatifs aux systèmes à deux niveaux. Cette conclusion concorde avec ce que nous avons affirmé ci-dessus au sujet de la généralisation des résultats du problème de l'électron dans un champ magnétique aux systèmes à deux niveaux quelconques.

§ 15. La fonction d'onde

Nous devons prévenir le lecteur qu'il ne trouvera pratiquement rien de nouveau dans ce paragraphe concernant les bases physiques de la mécanique quantique déjà exposées dans ce chapitre. En fait nous pourrions faire le bilan des aspects physiques de cette théorie et passer à son appareil mathématique basé sur la mise en œuvre des opérateurs linéaires. Il est cependant utile d'introduire d'abord le concept de *fonction d'onde*. Dans toute la littérature consacrée à la mécanique quantique on utilise largement ce concept, aussi est-il fort important que le lecteur se rende bien compte de la place qu'occupe la fonction d'onde au sein des conceptions relatives aux amplitudes de probabilité. Jusqu'à présent la fonction d'onde qui, en fait, n'est rien d'autre qu'une amplitude d'état, ne figurait dans les considérations que nous avons développées que d'une manière implicite; nous devons maintenant l'expliciter. Cela est d'autant plus nécessaire que l'utilisation de la fonction d'onde est plus commode que celle de l'amplitude d'état lorsqu'il s'agit de mettre en œuvre l'appareil mathématique de la mécanique quantique.

La fonction d'onde considérée comme une amplitude d'état. Soit $\langle x \mid$ l'état d'une microparticule localisée dans l'espace en un point de coordonnée x (pour simplifier on considère le cas *monodimensionnel*). On peut alors considérer que $\langle s \mid x \rangle$ représente l'amplitude de probabilité de ce que la microparticule à l'état $\langle s \mid$ se trouve au point de coordonnée x.

On doit cependant apporter la précision suivante. Lorsqu'on envisage la probabilité de présence d'une microparticule en un point de l'espace, on doit tenir compte de ce que la coordonnée spatiale peut varier de manière *continue*. De ce fait, au lieu de considérer la probabilité de présence de la microparticule en un point bien déterminé de l'espace, on doit considérer sa probabilité de présence à l'intérieur d'un intervalle défini par x et $x + dx$. En désignant cette dernière probabilité par $dw_s(x)$, nous écrirons

$$dw_s(x) = |\langle s \mid x \rangle|^2 \, dx. \tag{15.1}$$

Par conséquent, en toute rigueur la quantité $\langle s \mid x \rangle$ représente non pas une amplitude de probabilité, mais une *amplitude de densité de probabilité*.

Dans la littérature scientifique la quantité $\langle s \mid x \rangle$ est appelée *fonction d'onde* et on la désigne, par exemple, par le symbole $\psi_s(x)$. On a donc

$$\psi_s(x) = \langle s \mid x \rangle. \tag{15.2}$$

Avec (15.2) on écrira (15.1) sous la forme suivante

$$dw_s(x) = |\psi_s(x)|^2 \, dx. \tag{15.3}$$

Cette dernière équation montre que $|\psi_s(x)|^2$ est la densité de la probabilité de déceler la présence de la microparticule à l'état $\langle s|$ en un point x de l'espace. Mathématiquement la fonction d'onde $\psi_s(x)$ est une *fonction paramétrique* dont le paramètre est la valeur des grandeurs que l'on peut déterminer avec précision dans l'état $\langle s|$. En utilisant les considérations développées ci-dessus sur la structure des amplitudes d'état, on peut dire que l'argument de la fonction d'onde est constitué par les grandeurs appartenant à un ensemble complet, et son *paramètre* est constitué par les grandeurs d'un autre ensemble. D'habitude on dit que la fonction d'onde $\psi_s(x)$ est la *fonction propre* des grandeurs de l'ensemble s, donnée dans une *représentation* définie par les grandeurs de l'ensemble x (ou plus simplement dans une représentation en x).

Généralisation du concept de fonction d'onde. Dans les applications pratiques on utilise souvent des fonctions d'onde données dans la représentation en x (*représentation en coordonnées*). Mais à côté de cette représentation-là on peut utiliser d'autres types de représentation ; il convient donc de généraliser la notion de fonction d'onde

$$\psi_\alpha(\beta) = \langle\alpha|\beta\rangle. \tag{15.4}$$

La fonction $\psi_\alpha(\beta)$ est la fonction propre des grandeurs de l'ensemble α donnée dans la représentation en β. Dans le cas où les grandeurs de l'ensemble β varient de façon discrète, $\psi_\alpha(\beta)$ représente l'amplitude de la probabilité de ce que l'état $\langle\beta|$ est représenté dans l'état $\langle\alpha|$. Dans le cas où les grandeurs de l'ensemble β varient de façon continue, $\psi_\alpha(\beta)$ est l'amplitude de la densité de cette même probabilité.

Lorsqu'on donne la fonction d'onde $\psi_\alpha(\beta)$, on donne les valeurs *exactes* des grandeurs de l'ensemble α ainsi que les valeurs *probables* des grandeurs de l'ensemble β. De même, si on donne la fonction $\varphi_\alpha(\gamma)$, on donne les valeurs précises des grandeurs de l'ensemble α et les valeurs probables des grandeurs de l'ensemble γ. On dit alors que la fonction $\psi_\alpha(\beta)$ caractérise l'état $\langle\alpha|$ dans la représentation en β et la fonction $\varphi_\alpha(\gamma)$ caractérise le même état dans la représentation en γ. Le fait que l'on utilise des fonctions $\psi_\alpha(\beta)$ et $\varphi_\alpha(\gamma)$ différentes pour décrire un seul et même état $\langle\alpha|$ témoigne de ce qu'il doit exister entre ces fonctions une certaine corrélation. Cette corrélation exprime précisément le *principe de superposition* des états. Dans le cas où la variation des grandeurs γ est discrète nous avons

$$\psi_\alpha(\beta) = \sum_i \varphi_\alpha(\gamma_i)\,\chi_{\gamma_i}(\beta). \tag{15.5}$$

Il est facile de se rendre compte que (15.5) exprime la superposition des amplitudes d'état :

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \sum_i \langle\alpha|\gamma_i\rangle\langle\gamma_i|\beta\rangle. \tag{15.5a}$$

Dans le cas où les grandeurs γ varient de façon continue, au lieu de (15.5) on doit avoir

$$\psi_\alpha(\beta) = \int \varphi_\alpha(\gamma)\, \chi_\gamma(\beta)\, d\gamma. \tag{15.6}$$

Considérons la fonction propre des grandeurs d'un certain ensemble, donnée dans une représentation définie par rapport aux grandeurs de ce même ensemble. Si la variation de ces grandeurs est discrète, on écrira d'après (10.8):

$$\Psi_{\alpha_i}(\alpha_j) = \delta_{ij}. \tag{15.7}$$

Si la variation est continue, au lieu de (15.7) on aura

$$\Psi_{\alpha'}(\alpha) = \delta(\alpha - \alpha'). \tag{15.8}$$

$\delta(\alpha - \alpha')$ est la *fonction delta de Dirac*, qui est une généralisation du symbole de Kronecker au cas d'une variation continue des grandeurs concernées *.

La fonction delta est définie par

$$\delta(\alpha - \alpha') = 0 \text{ avec } \alpha \neq \alpha'; \quad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\alpha - \alpha')\, d\alpha = 1. \tag{15.9}$$

Il est en toute rigueur impossible de donner une représentation graphique de la fonction $\delta(\alpha - \alpha')$ puisqu'on devrait représenter au point $\alpha = \alpha'$ un pic indéfiniment haut et indéfiniment étroit, délimitant une aire finie et égale à 1. Une des principales propriétés de la fonction δ, découlant de la définition (15.9), s'exprime par l'égalité suivante

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(\alpha)\, \delta(\alpha - \alpha')\, d\alpha = f(\alpha'), \tag{15.10}$$

où $f(\alpha)$ est une fonction limitée qui reste continue au point $\alpha = \alpha'$.

Condition d'orthonormation des fonctions propres. En supposant que les grandeurs α sont discrètes et que les grandeurs β sont continues, nous pouvons transcrire (15.6) sous la forme suivante

$$\Psi_{\alpha_i}(\alpha_j) = \int \psi_{\alpha_i}(\beta)\, \Phi_\beta(\alpha_j)\, d\beta. \tag{15.11}$$

A l'aide de (9.33) nous pouvons écrire

$$\Phi_\beta(\alpha_j) = \psi^*_{\alpha_j}(\beta). \tag{15.12}$$

Avec (15.12) et (15.7) on tire de (15.11) la condition d'orthonormation des fonctions propres $\psi_{\alpha_i}(\beta)$:

$$\int \psi_{\alpha_i}(\beta)\, \psi^*_{\alpha_j}(\beta)\, d\beta = \delta_{ij}. \tag{15.13}$$

* Le lecteur peut consulter [13] pour un exposé détaillé de la fonction δ.

Si les grandeurs α varient de façon continue, on doit utiliser (15.8) au lieu de (15.7) et la condition d'orthonormation des fonctions propres s'écrira

$$\int \psi_\alpha(\beta)\,\psi^*_{\alpha'}(\beta)\,d\beta = \delta(\alpha-\alpha'). \qquad (15.14)$$

La fonction d'onde d'une microparticule en mouvement libre. Prenons à titre d'exemple le cas d'une microparticule en mouvement libre, en supposant pour simplifier qu'elle n'a pas de spin. Dans la représentation en coordonnées (tridimensionnelle) la fonction d'onde se présente sous la forme *

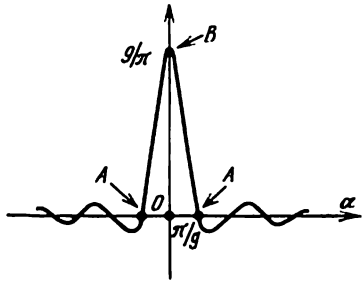


Fig. 15.1.

$$\psi_{\vec{p}_0}(\vec{r}) = \langle \vec{p}_0 \mid \vec{r}\rangle = (2\pi\hbar)^{-3/2}\exp(i\vec{p}_0\vec{r}/\hbar), \qquad (15.15)$$

où $\vec{p}_0$ est l'impulsion de la microparticule et $\vec{r}$ sa coordonnée spatiale. La fonction $\psi_{\vec{p}_0}(\vec{r})$ est la fonction propre de l'impulsion donnée dans la représentation en coordonnées; cette fonction décrit un état dans lequel les composantes de l'impulsion de la microparticule ont des valeurs bien déterminées, tandis que ses coordonnées spatiales ne peuvent être données qu'aléatoirement.

Pour passer de la *représentation en coordonnées* à la *représentation en impulsion*, nous utiliserons le résultat (9.33), et nous obtenons alors

$$\varphi_{\vec{r}_0}(\vec{p}) = \langle \vec{r}_0 \mid \vec{p}\rangle = \langle \vec{p} \mid \vec{r}_0\rangle^* = (2\pi\hbar)^{-3/2}\exp(-i\vec{p}\vec{r}_0/\hbar). \qquad (15.16)$$

La fonction $\varphi_{\vec{r}_0}(\vec{p})$ est la fonction propre de la coordonnée de la microparticule donnée dans la représentation en impulsion.

Les formules (15.15) et (15.16) montrent que les états d'une microparticule en mouvement libre sont décrits par des fonctions d'onde ayant la forme d'*ondes planes* (dans l'espace de coordonnées ou dans l'espace des impulsions).

Les fonctions $\psi_{\vec{p}_0}(\vec{r})$ et $\varphi_{\vec{r}_0}(\vec{p})$ satisfont à la condition d'orthonormation (15.14). Pour s'en rendre compte, il suffit d'utiliser la

* Nous démontrerons ce résultat dans ce qui suit (cf. § 20).

forme intégrale de la fonction delta *

$$\delta(\alpha) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\alpha\beta)\, d\beta \qquad (15.17)$$

(α et β désignent ici les composantes de la coordonnée spatiale et de l'impulsion de la microparticule).

§ 16. La mécanique quantique représente un bond qualitatif dans la connaissance des lois de la nature

« Il est évidemment impossible de délimiter nettement la philosophie des sciences de la nature et la culture humaine. Effectivement les sciences physiques sont une partie intégrante de notre civilisation. Cela tient non seulement à ce que la conquête des forces de la nature a radicalement modifié les conditions matérielles de la vie humaine, mais également à ce que le développement de ces sciences a largement contribué à connaître l'environnement dans lequel nous vivons tous. »

N. Bohr

Bien que la mécanique quantique ait affaire aux microparticules, son importance n'est nullement limitée à l'étude des microphénomènes. Dans le processus d'approfondissement et de perfectionnement incessant de notre connaissance des lois de la Nature l'élaboration de la mécanique quantique doit être considérée comme un *bond qualitatif* de grande importance. On ne saurait comprendre les *conceptions physiques modernes* sans avoir au préalable bien compris toute l'importance, toute la spécificité et le caractère révolutionnaire de

* Considérons la fonction $\sin(g\alpha)/\pi\alpha$ (fig. 15.1). Quelle que soit la valeur du paramètre g, on a : $\int_{-\infty}^{\infty} d\alpha \sin(g\alpha)/\pi\alpha = 1$. Faisons croître g. Les points A de la fig. 15.1 se rapprochent de plus en plus de $\alpha = 0$, et le point β se déplacera en haut de l'axe des ordonnées. A la limite $g \to \infty$ on obtiendra un pic infiniment fin et infiniment haut, dont l'intégrale est égale à 1. C'est précisément la fonction delta. On a donc $\delta(\alpha) = \lim_{g\to\infty} \sin(g\alpha)/\pi\alpha$. De là il est facile de déduire (15.17) en remarquant que $\sin g\alpha/\pi\alpha = 1/2\pi \int_{-g}^{g} \exp(i\alpha\beta)\, d\beta$.

ce bond qualitatif. Dans ce paragraphe nous nous hasarderons à ausculter la mécanique quantique de ce point de vue, ce qui à notre sens constitue un achèvement logique du chapitre consacré aux bases physiques de cette extraordinaire théorie.

Les « idées insensées ». L'expression « théorie insensée » est due à N. Bohr qui disait qu'une « *théorie doit paraître suffisamment insensée pour être vraie* ». Cette phrase reflète bien l'impression que produisaient sur les contemporains de Bohr les étonnantes découvertes de la physique du début du XXe siècle qui ne se laissaient pas interpréter dans le cadre de la physique classique. Il semblait évident que pour expliquer ces nouveaux faits expérimentaux on devait recourir à de nouvelles idées, trouver une nouvelle approche.

Au paragraphe 2 nous avons exposé les deux idées de base de la mécanique quantique: *l'idée du caractère discret des grandeurs* et *l'idée du dualisme*. Si nous nous reportons au début du siècle, on pourrait dire que la première de ces idées était « incompréhensible » et la deuxième « incomprise ». L'introduction dans l'image que l'on se faisait du monde de la notion du caractère discret des phénomènes conduisait à des « sauts » quantiques parfaitement incompréhensibles et paraissant logiquement contradictoires. L'idée du dualisme, tout en affirmant la spécificité des microparticules, éliminait les contradictions des « sauts » quantiques et suggérait qu'il fallait louvoyer entre les concepts de « corpuscule » et « d'onde ». Pendant longtemps la signification de la notion d'onde restait incomprise. La conséquence de ces deux « idées insensées » a été l'apparition des extravagantes *relations d'incertitudes*, qui ont contraint les physiciens à reconsidérer même des notions aussi fondamentales que l'« énergie », l'« impulsion », le « moment cinétique ».

La mécanique quantique naissait à une époque où les traditions physiques commençaient à éclater. Son avènement exigeait que l'*on abandonne* de nombreuses conceptions devenues usuelles; on devait renoncer à l'idée que les spectres de valeurs des grandeurs physiques étaient obligatoirement continus, à la notion de trajectoire — attribut nécessaire du mouvement de tout objet, au déterminisme laplacien — expression essentielle du principe de causalité, à la possibilité d'une subdivision indéfinie de la structure de l'objet ou d'un fractionnement dans le temps d'un processus, à la possibilité de distinguer, quelles que soient les conditions, deux objets aussi semblables qu'ils soient, à la conviction que lors des mesures on peut, ne serait-ce qu'en principe, faire abstraction de l'appareil de mesure, etc. (toutes ces questions ont été examinées dans les paragraphes précédents).

On ne connaît aucune autre période de l'histoire de la physique où les conceptions physiques ont été soumises à une révision aussi profonde et aussi générale. N. Bohr (cf. « Philosophie des sciences de la nature et culture des peuples » in [6]) écrivait à ce propos: « *les*

physiciens ont reçu une bonne leçon qui leur a fait comprendre avec quelle précaution on devait user de toutes les conceptions devenues habituelles, chaque fois que l'on se trouvait en présence de faits sortant de l'ordinaire... En étudiant les phénomènes atomiques, nous avons maintes fois eu l'occasion de constater que les questions qui semblaient résolues une fois pour toutes recelaient parfois des surprises ».

Les idées essentielles de la mécanique quantique. La révision et le rejet des notions devenues habituelles peuvent être considérés à un certain point de vue comme « l'apport négatif » de la mécanique quantique. Voyons maintenant quel a été son « apport positif ».

Si l'on cherche à dégager l'essentiel de la contribution positive de la mécanique quantique à la connaissance du monde entourant l'homme de toute part, on ne peut manquer de faire ressortir les deux aspects suivants.

Premièrement: la mécanique quantique a démontré que *les principales lois de la nature ne sont pas les lois dynamiques, mais les lois de type statistique* et que *la forme contingente de la causalité prédomine largement*, le déterminisme classique n'étant qu'un cas *limite* (dégénéré) de cette forme contingente.

Deuxièmement: la mécanique quantique a révélé que l'*on ne doit pas traiter les questions des probabilités de la nature de la même façon qu'on le fait dans les théories statistiques classiques*; il s'est avéré que dans certains cas on doit sommer non pas les probabilités elles-mêmes, mais les amplitudes de ces probabilités d'occurrence des événements; c'est cette circonstance qui fait apparaître l'effet spécifique d'*interférence des amplitudes de probabilité*.

Nous pouvons donc dégager en premier lieu le *caractère aléatoire des lois de la nature* (primat des lois statistiques) puis l'existence de *corrélations particulières entre les probabilités* qui admettent non seulement leur sommation, mais également des effets spécifiques d'interférence. Il nous semble que c'est en cela que réside la valeur des connaissances que la mécanique quantique a mises à la disposition de l'homme.

Selon Born [14]: « *A mesure que la science se développait, les méthodes statistiques de la physique trouvaient des applications de plus en plus nombreuses, de sorte qu'aujourd'hui on peut affirmer que la physique moderne s'appuie toute entière sur une base statistique... De nos jours la théorie quantique a enrichi nos connaissances en ce qu'elle a établi un lien entre la statistique et les fondements de la physique. C'est un événement considérable dans l'histoire de la pensée humaine, dont l'importance dépasse largement le cadre de la science.* »

On affirme parfois que la différence essentielle entre la mécanique quantique et la mécanique classique est déterminée par le caractère statistique de la première et le caractère dynamique de la seconde. Mais cette affirmation, qui à première vue paraît impeccable, est cependant erronée. La mécanique quantique, en affirmant le primat

des lois statistiques en physique, nous démontre par cela même que les lois dynamiques donnant des prévisions univoques ne sont qu'un cas particulier (dégénéré) des lois aléatoires. Considérées sous cet aspect, non seulement la mécanique quantique, mais aussi la mécanique classique devraient être formulées en termes de probabilités *. La différence qualitative entre la mécanique quantique et la mécanique classique (et d'une manière générale, la physique classique) se révèle par la manière d'aborder les corrélations entre les probabilités.

Dans [27] on l'exprime de la manière suivante : « *Ce n'est nullement par son caractère statistique que la mécanique quantique se distingue essentiellement de la mécanique classique. La principale différence entre ces deux mécaniques réside en ce qu'en mécanique quantique le concept prédominant n'est pas la probabilité, mais son amplitude, autrement dit la fonction d'onde. C'est de là que résulte l'interférence des amplitudes qui est un effet inconnu en mécanique classique.* »

Partant de ces remarques, nous pouvons dégager les aspects suivants : a) la nature particulière des corrélations entre les états et la spécificité de la description quanto-mécanique des phénomènes ; b) le caractère spécifique de la mise en œuvre des probabilités en mécanique quantique ; c) le rôle éminent des effets d'interférence en mécanique quantique ; d) le principe de complémentarité en tant que fondement logique de la mécanique quantique ; e) le caractère dialectique de la mécanique quantique. Nous allons examiner successivement ces questions.

Spécificité de la description quanto-mécanique des phénomènes physiques. Feynman [3] a remarqué que « *l'une des plus remarquables qualités de la mécanique quantique est qu'en partant d'aussi peu de choses, on arrive à en déduire une telle quantité de résultats* ». Le lecteur a pu se rendre compte quelle quantité de résultats on arrive à tirer de l'existence de l'effet d'interférence des amplitudes (§ 9), du principe de superposition des états (§ 10) et de l'étude de systèmes quantiques les plus simples — systèmes de microparticules à deux états de base (cf. § 13 et 14). La simplicité formelle du mode de description des microphénomènes résulte du procédé très spécifique de ces descriptions. Rappelons que pour donner une description quanto-mécanique d'un phénomène, on doit connaître en premier lieu les *états de base*, et en second lieu la *matrice de Hamilton* reflétant la physique du phénomène. La description se trouve simplifiée grâce aux circonstances suivantes.

Premièrement, le nombre d'états de base nécessaire pour décrire un phénomène donné, et par suite le nombre d'éléments de la matrice

* Ce point de vue est développé de manière conséquente dans [27], où l'on fait remarquer que la méthode de Feynman d'intégrales le long des trajectoires ramène en fait le principe de moindre action à celui du maximum de probabilité, et démontre donc que le principe fondamental de la dynamique est de nature essentiellement statistique.

de Hamilton, peut être *petit*. Ainsi, dans les exemples que nous avons considérés aux paragraphes 13 et 14 ce nombre était égal à deux. Cela ne donne pas lieu à des contradictions avec le fait que la microparticule peut se trouver dans un grand nombre d'états, puisque l'application du principe de superposition permet de représenter n'importe quel état sous forme d'une superposition des états de base. C'est justement grâce au principe de superposition que l'on arrive à se contenter d'un petit nombre d'états choisis en qualité d'états de base. Dirac écrivait à ce propos [9] : « *en abandonnant le déterminisme de la théorie classique, nous rendons plus compliquée la description de la nature. Cependant cette complication se trouve largement compensée par la simplification qui résulte de la mise en œuvre du principe de superposition des états* ».

Nous avons déjà mentionné (cf. § 10) qu'en physique classique tous les états d'un objet doivent être considérés comme mutuellement orthogonaux, donc comme des états de base. C'est pour cette raison qu'il est en principe impossible de mettre en œuvre ici la simplification dont il a été question ci-dessus.

Deuxièmement, la simplicité relative des corrélations de superposition permet d'établir des *analogies* entre des microparticules disposant d'un même nombre d'états de base et de ramener toute la multitude des problèmes réels aux problèmes ne comportant que deux, trois ou plusieurs états. Nous avons montré au § 14 de quelle manière on pouvait ramener un problème quelconque concernant un système à deux états au problème de l'électron soumis à l'action d'un champ magnétique.

Il est bien évident que l'on ne doit pas en conclure que « la mécanique quantique serait plus simple que la mécanique classique ». Dans le sens que nous venons d'évoquer, elle est effectivement plus simple, mais elle comporte des difficultés qui lui sont inhérentes, notamment la difficulté d'un choix rationnel des états de base et celle du choix de la forme de la matrice de Hamilton. Il est superflu de revenir sur la question des difficultés qui découlent de la nécessité de renoncer aux modèles concrets et à nombre de conceptions devenues usuelles. Mais il serait tout à fait erroné d'affirmer : « la mécanique quantique, c'est tout simple ! ». Néanmoins on ne doit pas perdre de vue que les corrélations spéciales existant entre les états d'une microparticule et qui se révèlent dans le principe de superposition des états, simplifient grandement la description quanto-mécanique des microphénomènes.

La probabilité en mécanique quantique. L'avènement de la mécanique quantique impose que l'on reconsidère le théorème bien connu de l'addition des probabilités d'événements incompatibles. La mécanique quantique exige que l'on tienne compte non seulement de l'*incompatibilité* des événements, mais aussi de leur *discernabilité*. C'est en ceci que réside l'approche nouvelle. On sait qu'en théorie

des probabilités utilisée aussi bien en physique qu'en technique on sous-entend toujours que les événements sont discernables.

Pour illustrer toute la spécificité de la mise en œuvre des probabilités en mécanique quantique, nous utiliserons l'exemple de la diffusion mutuelle des bosons de même espèce que nous avons considéré aux paragraphes 9 et 10. Rappelons les notations que nous y avons utilisées: $\varphi(\theta) = \langle f_1 \mid s_1 \rangle \langle f_2 \mid s_2 \rangle$ est l'amplitude de probabilité de l'un des événements d'une transition, $\varphi(\pi - \theta) = \langle f_2 \mid s_1 \rangle \cdot \langle f_1 \mid s_2 \rangle$ est l'amplitude de probabilité de l'autre événement, w est la probabilité de déclenchement simultané des deux compteurs. Puisque les microparticules qui se diffusent mutuellement sont de même espèce, la question de leur discernabilité (par conséquent, de la discernabilité des événements enregistrés par les compteurs) se réduit à celle de la discernabilité des états initiaux $\langle s_1 \mid$ et $\langle s_2 \mid$. On peut donc distinguer trois cas.

Premier cas: *les événements sont totalement indiscernables.* Cela signifie que les états initiaux sont identiques, et par suite

$$| \langle s_1 \mid s_2 \rangle | = 1. \tag{16.1}$$

On a alors [cf. (9.17)]:

$$w = | \varphi(\theta) + \varphi(\pi - \theta) |^2. \tag{16.2}$$

Deuxième cas: *les événements sont partiellement discernables.* Cela signifie que l'amplitude de $\langle s_1 \mid s_2 \rangle$ satisfait à la condition suivante:

$$0 < | \langle s_1 \mid s_2 \rangle | < 1. \tag{16.3}$$

Nous avons dans ce cas [cf. (10.7)]

$$w = | \varphi(\theta) |^2 + | \varphi(\pi - \theta) |^2 + \\ + | \langle s_1 \mid s_2 \rangle |^2 [\varphi(\theta) \varphi^*(\pi - \theta) + \varphi^*(\theta) \varphi(\pi - \theta)]. \tag{16.4}$$

Troisième cas: *les événements sont parfaitement discernables.* Cela signifie que l'amplitude $\langle s_1 \mid s_2 \rangle$ satisfait à la condition

$$\langle s_1 \mid s_2 \rangle = 0. \tag{16.5}$$

Nous avons alors [cf. (9.16)]:

$$w = | \varphi(\theta) |^2 + | \varphi(\pi - \theta) |^2. \tag{16.6}$$

Nous voyons donc que le théorème d'addition des probabilités ne s'applique qu'au troisième cas, celui d'événements parfaitement discernables. Il apparaît de (16.5) que dans ce cas les états $\langle s_1 \mid$ et $\langle s_2 \mid$ doivent être *mutuellement orthogonaux* *. Dans les autres cas le théorème d'addition des probabilités n'est pas valable. Si les

* Il convient de préciser que l'orthogonalité mutuelle de tous les états d'un objet classique détermine une discernabilité parfaite de tous les événements, ce qui entraîne la validité du théorème d'addition des probabilités.

événements sont totalement indiscernables, on doit sommer les amplitudes des probabilités ; si les événements ne sont que partiellement discernables, on doit mettre en œuvre la formule plus compliquée (16.4). Pour établir cette dernière formule, on utilise simultanément les règles de sommation des amplitudes et le théorème de sommation des probabilités, comme on l'avait au § 9 pour établir la formule (9.10).

Il est facile de voir que la formule (16.4) résultant d'une part de la sommation des probabilités et d'autre part de la sommation des amplitudes représente le résultat le plus général. Si les conditions (16.5) sont remplies, on en déduit aussitôt le cas purement classique de la sommation des probabilités, tandis que si ce sont les conditions (16.1) qui sont satisfaites, il en découle le cas de la sommation des amplitudes des probabilités.

Il importe de bien faire ressortir que le résultat (16.4) n'est déterminé que par l'*existence de corrélations de superposition* entre les états $\langle s_1 \mid$ et $\langle s_2 \mid$ [cf. (10.6)]. Ces considérations permettent de montrer la liaison intime existant entre le principe quanto-mécanique de la superposition des états et le mode spécifique de mise en œuvre des probabilités en mécanique quantique. Les corrélations de superposition existant entre les états et l'interférence des amplitudes de probabilités sont de même origine physique.

La mécanique quantique et les effets d'interférence. Nous voulons attirer l'attention du lecteur sur les circonstances suivantes. Afin de donner une interprétation des résultats d'interférence que l'on obtient dans les expériences concernant des microparticules (par exemple, les figures d'interférence apparaissant sur l'écran détecteur de l'expérience n° 1 du § 7), on peut utiliser tout formellement deux approches différentes. La première approche correspond au maintien dans la mécanique quantique du théorème d'addition des probabilités d'occurrence de n'importe quels événements incompatibles. Mais on doit alors faire correspondre à la microparticule une onde classique. La deuxième approche utilise la sommation des amplitudes des probabilités ; dans ce dernier cas on n'a plus besoin de faire intervenir un modèle ondulatoire concret pour expliquer l'apparition d'un effet d'interférence.

Le caractère spécifique des microparticules que nous avons examiné en détail dans les paragraphes précédents nous conduit à exclure la première approche et à considérer dans un plan différent les questions de l'interférence et des processus ondulatoires. Tant que la mécanique quantique n'existait pas, on citait le phénomène d'interférence comme un exemple d'un effet typiquement ondulatoire. Si on observait dans une expérience quelconque l'apparition de franges d'interférence, c'était une raison suffisante pour conclure à la présence d'ondes. Dans ces conditions les *ondes* étaient considérées comme une entité *primaire* et l'*interférence* comme un résultat *secon-*

daire. La mécanique quantique montre qu'il serait plus justifié d'*inverser* cet ordre.

Ayant établi que les lois aléatoires de la nature se basent surtout sur une sommation des amplitudes des probabilités et non sur celle des probabilités elles-mêmes, la mécanique quantique a mis en évidence le rôle fondamental que jouent les effets d'interférence dans les phénomènes physiques. En même temps elle a bien montré que l'apparition des effets d'interférence n'implique pas nécessairement des processus ondulatoires classiques. *Dans le cas le plus général l'interférence est un effet typiquement quantique, déterminé par la sommation des amplitudes des probabilités.*

Cependant les traditions ont la vie dure et c'est ce qui explique les tentatives de « traduire » l'interférence des amplitudes des probabilités en langage imagé des ondes classiques, ce qui conduit inévitablement à un emploi abusif de la terminologie ondulatoire (cf. intermède : De quelles ondes s'agit-il ?). Dans différents cas l'utilisation d'une terminologie ondulatoire est mal venue, même d'un point de vue purement formel. Ainsi, par exemple, il est très difficile d'expliquer, en se basant sur les phénomènes ondulatoires, une conséquence aussi importante de l'interférence des amplitudes que la subdivision des microparticules en fermions et en bosons. L'analyse du processus de destruction de l'interférence des amplitudes lors d'une mesure (analyse de la « réduction du paquet d'onde ») implique que l'utilisation des conceptions ondulatoires classiques est complètement injustifiée lorsqu'il s'agit de microphénomènes. Tout cela témoigne de ce que l'interprétation des effets d'interférence ne cadre nullement avec les conceptions ondulatoires classiques.

Notons que cette dernière conclusion peut être prise comme point de départ pour procéder à une généralisation du concept « processus ondulatoire ». Une telle généralisation présuppose qu'on remplace les ondes classiques faciles à visualiser et caractérisées par des amplitudes réelles par des ondes généralisées dont les *amplitudes seraient complexes.* Les ondes classiques doivent alors constituer un cas limite (cas dégénéré) de ce concept d'onde généralisé. Autrement dit, l'effet d'interférence quanto-mécanique pourrait être utilisé pour élargir le cadre de la conception ondulatoire usuelle (ce qui exigerait l'abandon de toute idée de visualisation) et d'élaborer une théorie des processus ondulatoires généralisés qui refléterait le caractère aléatoire des lois de la physique ainsi que les liens spéciaux existant dans les phénomènes naturels entre les probabilités.

Ayant établi le caractère fondamental du phénomène d'interférence, la mécanique quantique a indubitablement stimulé les recherches concernant ce phénomène dans différents domaines de la physique. A notre sens, on peut penser que la physique moderne, s'appuyant sur le *concept d'interférence*, pourrait se développer grâce à

l'étude des effets d'*interférence des phénomènes*, qu'il s'agisse de micro- ou de macrophénomènes.

Nous sommes bien habitués à l'idée de la sommation (de l'accumulation) de différents phénomènes et on pourrait, nous semble-t-il, établir un parallèle avec la sommation des probabilités. Il est bien possible que la mécanique quantique nous indique qu'un tel résultat représenterait un certain « moyennage », enlaidissant et simplifiant une image belle et fine tracée non par la « sommation » des phénomènes proprement dits, mais par autre chose (ce que la mécanique quantique dénomme amplitude des probabilités) ; et c'est alors que se manifeste l'effet d'interférence des phénomènes.

Un bref intermède

LECTEUR : Je ne saisis pas du tout ce que vous avez voulu laisser entendre par ces dernières phrases imagées mais peu concrètes. Voudriez-vous les expliciter.
AUTEUR : Bien volontiers. Je prendrai pour cela un exemple concret. On sait que si l'on place de la matière entre les plaques d'un condensateur, on peut observer que les propriétés optiques de la matière varient sous l'influence du champ électrique appliqué. De tels effets sont désignés sous le nom d'effets *électro-optiques*. Si on soumet la matière à l'action d'une onde lumineuse d'intensité suffisamment grande (en utilisant un laser de grande puissance), on constate que dans ce cas-là aussi les propriétés optiques de la matière se trouvent modifiées. On a affaire dans ce dernier cas à un *effet optique non linéaire*. Or si on soumet la matière à l'*action simultanée* du champ électrique d'un condensateur et d'une onde de lumière de grande intensité, on observe à côté de l'effet électro-optique et de l'effet optique non linéaire d'autres effets *supplémentaires* qualitativement nouveaux que l'on peut interpréter comme le résultat d'*une sorte d'interférence* de l'électro-optique et de l'optique non linéaire. Voilà un exemple d'interférence de phénomènes physiques qui trouve déjà des applications pratiques.
LECTEUR : Mais cet exemple témoigne-t-il d'une tendance déterminée dans le développement de la physique moderne?
AUTEUR : Considérons un autre exemple. Prenons un *laser*. Sans entrer dans les détails de son principe de fonctionnement, notons qu'il est basé sur un certain phénomène optique non linéaire, qui porte le nom d'*effet de saturation*. Prenons un autre dispositif encore — un *générateur d'un deuxième harmonique* ; en électronique quantique on désigne par ce nom un transformateur de lumière cohérente qui double la fréquence de la lumière émise. Nous pouvons tout aussi formellement remarquer qu'à la base du fonctionnement de ce dispositif on trouve un effet optique non linéaire appelé *génération d'un harmonique second*. Par conséquent, le laser émet une lumière cohérente d'une certaine longueur d'onde, et le générateur d'un deuxième harmonique modifie la fréquence de ce rayonnement laser. On peut dire que nous mettons en œuvre *d'abord* l'effet de saturation et ce n'est qu'*ensuite* que nous faisons intervenir la génération d'un deuxième harmonique. C'est l'exemple d'une situation typique où deux effets « s'additionnent ». Supposons maintenant qu'on mette en œuvre *simultanément* ces deux effets ; pour ce faire, un cristal spécialement conçu pour assurer un changement de fréquence doit être disposé à l'intérieur de la cavité résonnante du laser. On peut dire que l'on se trouve alors en présence d'un cas qualitativement nouveau correspondant à l'*interférence des deux effets optiques non linéaires*. Ce sont surtout des cas semblables qui attirent de plus en plus l'attention des chercheurs travaillant dans le domaine de l'électronique quantique. La génération du deuxième harmonique dans la cavité résonnante est utilisée en pratique, et on a la preuve

que ce procédé assure une meilleure efficacité du changement de la fréquence de rayonnement laser.
LECTEUR : Cela semble en effet intéressant, et on peut y discerner une certaine tendance. Mais que vient faire ici la mécanique quantique?
AUTEUR : La mécanique quantique qui étudie la réalité à un niveau fondamental a réussi à mettre en évidence certains points cruciaux. Elle a démontré que la question d'interférence est *plus complexe* que cela est généralement admis et qu'elle peut être posée indépendamment de toute considération ondulatoire, et qu'enfin l'interférence est un exemple de liens, de corrélations qualitativement nouvelles; ces corrélations nouvelles offrent de meilleures potentialités que les corrélations traditionnelles consistant en une simple accumulation, addition d'effets différents.

Le principe de complémentarité. Le *caractère dialectique* de la mécanique quantique apparaît déjà dans les principes de base. De ce point de vue on doit accorder une attention particulière au *principe de complémentarité* énoncé par Bohr. En fait ce principe constitue le fondement logique de tout le système de conceptions quanto-mécaniques.

Le contenu du principe de complémentarité est le suivant. On affirme que dans toute expérience avec des microparticules l'observateur recueille des informations concernant non pas les « propriétés des objets à l'étude proprement dits », mais concernant leurs propriétés par rapport à une situation, un entourage concret, les appareils de mesure y compris. Les informations concernant la microparticule qu'on aura obtenues dans certaines conditions *bien déterminées* doivent être considérées comme *complémentaires* aux informations obtenues dans d'*autres* conditions. Ce qui importe c'est que les informations recueillies dans des conditions différentes ne peuvent être simplement sommées, combinées pour obtenir une carte de données; ces informations reflètent des aspects différents (et complémentaires les uns des autres) d'une seule et même réalité, représentée par l'objet à l'étude. Le principe de complémentarité trouve une application directe dans l'idée du dualisme onde-corpuscule et dans les relations d'incertitude.

Donnons la parole à N. Bohr: « *Le terme « complémentarité » exprime le fait que lorsque nous nous trouvons en présence de phénomènes contradictoires, nous avons affaire à des aspects différents mais également importants d'un seul ensemble de données concernant l'objet de nos études* » (cf. [33]).

« *En physique atomique on utilise le terme « complémentarité » pour caractériser les liens existant entre les données factuelles obtenues dans des conditions expérimentales différentes, et qui ne peuvent être interprétées d'une manière concrète qu'en utilisant des conceptions qui s'excluent mutuellement* » (cf. « Philosophie des sciences naturelles et de la culture des peuples » in [6]).

« *Les données qu'on peut obtenir dans différentes conditions expérimentales ne se laissent pas disposer dans un seul tableau et doivent être considérées comme complémentaires les unes des autres* » (cf. « Dis-

cussion avec A. Einstein sur les problèmes de la théorie des connaissances en physique atomique » in [6].

« *En physique quantique les données concernant les microparticules qui ont été obtenues à l'aide de dispositifs expérimentaux différents se trouvent les unes par rapport aux autres dans des rapports de complémentarité fort particuliers. On doit en effet reconnaître que ces données, bien que paraissant contradictoires lorsqu'on essaie de les assembler, contiennent tous les renseignements que nous pouvons tirer de l'étude de l'objet* » (« Physique quantique et philosophie » in [6]).

Nous recommandons au lecteur de relire attentivement ce qu'a écrit N. Bohr. Il dit en effet que les données concernant les microparticules ne peuvent être « *interprétées d'une manière concrète* » qu'en utilisant « *des conceptions qui s'excluent mutuellement* ». Elles ne peuvent donc être simplement juxtaposées et « *ne se laissent pas disposer dans un seul tableau* ». Les différentes données se trouvent les unes par rapport aux autres dans des rapports « *fort particuliers* » (le lecteur voudra bien le noter) et c'est pourquoi on use du terme « complémentarité » . Les rapports fort particuliers de la complémentarité ne se révèlent qu'entre des données complémentaires ne pouvant être obtenues que « *dans des conditions expérimentales différentes* ».

Le caractère hautement spécifique des conceptions quanto-mécaniques que nous avons maintes fois souligné et leur logique inusitée reposent dans une large mesure sur le principe de complémentarité. Une microparticule n'est ni une onde, ni un corpuscule, mais nous pouvons utiliser ces concepts qui excluent l'un l'autre pour décrire la microparticule. Donnons-nous la peine de penser cette situation : les images de l'onde et du corpuscule sont utilisées pour décrire un objet qui n'est ni une onde ni un corpuscule, ni même leur symbiose ! Il est tout naturel qu'à ce propos peut surgir une question délicate : ne peut-il se produire que l'image ne colle pas à l'objet, ce qui risquerait de nous plonger dans le subjectivisme ? On peut répondre par la négative en nous appuyant justement sur le principe de complémentarité. D'après ce principe, des images qui s'excluent mutuellement sont utilisées de telle manière que *l'une complète l'autre* et reflètent adéquatement des aspects différents d'une réalité objective, désignée sous le nom de microparticule. Bohr écrivait à ce propos : « *Cette considération est importante pour la logique, car le fait que nous ayons à décider de fixer notre attention ou bien* (!) *sur la trajectoire de la particule, ou bien* (!) *sur l'interférence nous permet d'échapper à la conclusion paradoxale d'après laquelle le comportement de l'électron ou du photon devrait dépendre de l'existence dans l'écran d'une fente à travers laquelle ces particules ne sont sûrement pas passées* (« Discussion avec A. Einstein sur les problèmes de la théorie des connaissances en physique atomique » in [6].)

Caractère dialectique de la mécanique quantique. Il va de soi que toute science physique présente un certain caractère dialectique.

On peut cependant affirmer que la physique classique, du fait de ses positions philosophiques (prévisions univoques dans les théories dynamiques, considération que tout objet est une combinaison de composantes déterminées, de même que tout phénomène est une succession d'événements élémentaires, etc.) tend vers la *métaphysique*. De ce point de vue le rôle de la mécanique quantique est primordial, puisqu'elle a démontré qu'à *un niveau plus élevé* de nos connaissances des lois de la nature correspond la mise en œuvre du *matérialisme dialectique*.

Cherchant à préciser les manifestations du caractère dialectique de la mécanique quantique, nous dégagerons deux aspects qui nous paraissent avoir le plus d'intérêt : c'est la confirmation de l'existence de corrélations de type dialectique et la mise en œuvre des catégories de la dialectique.

Confirmation de l'existence de corrélations de type dialectique. La méthode métaphysique procède par une simple *accumulation*, *sommation* de données, de propriétés, de concepts (nous dirons que le propre de cette méthode est l'existence de *rapports d'addition*). Ces rapports constituent en un certain sens le fondement logique de la physique classique. La mécanique quantique, elle, avance des rapports de qualité différente, des rapports de type dialectique que sont les *relations de complémentarité* et les *relations d'interférence*. Elle démontre que les données caractérisant un objet ne sont pas simplement additionnées les unes aux autres, puisqu'elles sont *complémentaires* les unes des autres, et que les probabilités d'événements différents sont non pas sommées, mais *interfèrent* entre elles. Dans ce qui précède, nous avons déjà illustré ces rapports spécifiques en considérant le principe de complémentarité et la spécificité de la mise en œuvre des probabilités en mécanique quantique. En procédant à une évaluation du principe de complémentarité et du concept d'interférence du point de vue des nouveaux rapports, des nouvelles corrélations résultant d'un niveau plus élevé de notre connaissance des lois de la nature, on doit reconnaître que la mécanique quantique détermine effectivement les tendances du développement de la physique moderne.

Mise en œuvre des catégories de la dialectique matérialiste. Dans les théories dynamiques classiques les concepts du nécessaire et du contingent, du possible et du réel ne se présentent pas comme des catégories dialectiques. La nécessité y est en opposition absolue (donc métaphysique) avec la contingence ; cette dernière est tout simplement bannie de la théorie, ce qui conduit aussitôt à *identifier* les concepts du possible et du réel. En tant que *catégories dialectiques*, liées entre elles par l'unité et la lutte des contraires, ces concepts apparaissent dans les théories statistiques et notamment en mécanique quantique. Il importe de bien remarquer que les catégories du nécessaire et du contingent, du possible et du réel sont appliquées

en mécanique quantique non seulement aux collectifs de particules, mais aux microparticules elles-mêmes *prises individuellement*. Tout au long de notre exposé, chaque fois que nous abordions un nouveau problème, nous avons cherché à appliquer à la mécanique quantique les catégories de la dialectique. Rappelons que ce n'est qu'en nous basant sur les concepts du nécessaire et du contingent que nous avons pu analyser le problème de la causalité en mécanique quantique. Ce n'est qu'en utilisant les catégories dialectiques des potentialités et de l'actualisation qu'il a été possible d'expliquer le principe quanto-mécanique de la superposition des états, ainsi que la destruction des superpositions dans l'acte de mesure.

Remarquons pour conclure que la mécanique quantique illustre fort bien l'opposition dialectique entre la forme et le contenu. Selon N. Bohr la mécanique quantique nous a enseigné « que la lutte entre la forme et le contenu ne cesse jamais » et « *que tout nouveau savoir nous arrive dans une enveloppe d'anciennes notions convenant bien à l'interprétation des expériences passées. Une telle enveloppe peut être trop étroite pour contenir de nouvelles données de l'expérience* ».

INTERMÈDE

Y A-T-IL OPPOSITION ENTRE LES CONCEPTIONS DE LA MÉCANIQUE QUANTIQUE ET LE « BON SENS »

A cette discussion participent, en plus de l'AUTEUR, deux physiciens (BOHR et COOPER) et deux hommes de lettres (DOBROLIOUBOV et CH. PERRAULT). Dans cette discussion on a utilisé les œuvres suivantes:
N. Bohr « Philosophie des sciences de la Nature et de la culture des peuples », 1938; N. Bohr « De l'unicité du savoir », 1954; N. A. Dobrolioubov » Du complexe d'Oblomov », 1859; Ch. Peurrault « Cendrillon »; L. Cooper « Physique pour tous ».

COOPER : Nombre de nos contemporains déplorent que la physique du XXe siècle est devenue tellement abstraite qu'elle a perdu tous les liens avec les choses que tout un chacun peut comprendre; elle contredit le bon sens en lui substituant des structures à tel point abstraites qu'elles ne peuvent plus être assimilées par un esprit moyen.
AUTEUR : C'est pour cette raison que j'aimerais entamer une discussion sur les conceptions quanto-mécaniques et le « bon sens ». Maintes fois j'ai entendu dire que la mécanique quantique est difficile à assimiler parce que ses conceptions vont à l'encontre du « bon sens ». Malheureusement personne ne sait au juste ce qu'est le « bon sens ». Si je ne m'abuse, vous estimez que le « bon sens » est une notion toute relative, puisqu'il évolue avec l'évolution de la science.
COOPER : Effectivement le bon sens de la nouvelle génération comporte des notions qui ont été à grand-peine élaborées par la génération précédente et ce qui était progressif pour elle est devenu pour la nouvelle génération une affaire de bon sens. On peut émettre des doutes quant à ce que la conception du monde de Newton aurait pu être une affaire de bon sens pour les Grecs du temps d'Aristote. Et tous ceux qui sont aujourd'hui parfaitement satisfaits de leur bon sens (qui aujourd'hui correspond aux conceptions de Newton) ne diffèrent en rien de ceux qui du temps de Newton déploraient que ses idées mécanistes ont ébranlé le monde merveilleux du Moyen Age.
AUTEUR : Il serait difficile de trouver à cela des contre-arguments, d'autant plus que les arguments avancés lèvent la question posée tout au début.
COOPER : Effectivement, le bon sens de la nouvelle génération de physiciens se base sur la théorie quantique. Ils se sont si parfaitement assimilé la structure même de la mécanique quantique que ses corrélations leur paraissent intuitivement évidentes.
AUTEUR : Tout en reconnaissant que ce point de vue est tout à fait légitime, nous voudrions poursuivre les débats sur la question du bon sens en lui donnant plus d'ampleur. D'autant plus que ce qui nous intéresse, ce n'est pas tellement le bon sens des physiciens que celui de l'homme moyen. De cet homme moyen qui se plaint de ce que la physique moderne soit devenue absolument « indigeste » pour une intelligence ordinaire.

Un de nos éminents protagonistes s'est fait le champion d'une approche de bon sens au problème de la mécanique quantique. Nous voulons lui demander qu'il rappelle lui-même les remarques qu'il avait faites, par exemple, à propos du principe de complémentarité.
BOHR : En physique atomique on utilise le terme « complémentarité » pour caractériser les corrélations existant entre des données obtenues dans des conditions expérimentales différentes et qui ne se laissent interpréter de manière

concrète qu'en usant de conceptions qui s'excluent mutuellement. En conservant à ce mot la signification que nous venons de lui donner, nous avons vraiment le droit de dire que les cultures humaines sont complémentaires les unes des autres. En effet chaque culture représente un équilibre harmonieux entre les conventions traditionnelles, ce sont ces conventions qui, en révélant les potentialités d'une vie humaine, font apparaître de nouveaux aspects de toutes les richesses qu'elle recèle.
AUTEUR : Que peut y avoir dans tout cela qui puisse être incompréhensible à l'homme moyen ? Or, en fin de compte, le principe de complémentarité c'est aussi les relations d'incertitude et le dualisme onde-corpuscule se manifestant pour les microparticules. Toutes ces idées dites incompréhensibles trouvent leur place non seulement dans les questions relatives à la culture de différents peuples, mais tout aussi bien dans les questions concernant la vie de tous les jours, les questions de psychologie, par exemple.
BOHR : Nous connaissons tous le vieil adage selon lequel, dès que nous commençons à analyser nos émotions, nous cessons de les éprouver. De même nous pouvons constater qu'entre les résultats d'expériences psychiques que nous décrivons en utilisant des mots tels que « pensée », « sentiment », etc., il existe des relations de complémentarité, analogues à celles existant entre les données concernant le comportement des atomes et obtenues dans des conditions expérimentales différentes.
AUTEUR : Ne pourrait-on aller plus loin encore ? Ne pourrait-on essayer d'établir des analogies entre les idées physiques modernes et les idées qu'on trouve dans les œuvres littéraires connues ? Il serait tentant de juxtaposer la vérité poétique et la vérité scientifique.
BOHR : Autrement dit, vous voudriez savoir s'il existe une vérité poétique ou spirituelle différente de la vérité scientifique ?
AUTEUR : C'est cela même.
BOHR : Nous ne pouvons manquer d'aborder la question des corrélations entre la science et les arts. La raison pour laquelle les arts arrivent à nous enrichir spirituellement réside en ce que les arts nous remettent à l'esprit le sens de l'harmonie qui ne se prête pas à une analyse systématique.
AUTEUR : Je vous remercie. Vous m'avez grandement aidé à me débarrasser de certains doutes. Et maintenant je me sens en mesure de donner des exemples concrets. Premier exemple, le roman de I. A. Gontcharov « Oblomov ». Voyons ce qu'écrivait au sujet du héros de ce roman l'un de nos interlocuteurs.
DOBROLIOUBOV : Je dirais, par exemple, ceci : les désirs d'Oblomov ne s'expriment que sous la forme conditionnelle : «que ce serait bien si ceci ou cela se réalisait », mais il est bien incapable de dire comment le faire. Aussi se plaît-il à rêvasser mais craint par dessus tout qu'arrive l'instant où les rêves prennent contact avec la réalité.
AUTEUR : Si je me rappelle bien, vous aviez établi un parallèle entre Oblomov et d'autres personnages littéraires — Onéguine, Pétchorine, Roudine.
DOBROLIOUBOV : En effet, ces personnages ont ceci de commun qu'ils aspirent tous à l'activité, mais toujours en vain, et qu'ils se savent tous de riches aptitudes, et savent tout aussi bien qu'ils n'en feront rien.
AUTEUR (s'adressant à Bohr) : Qu'est-ce que vous en pensez ?
BOHR : Je voudrais noter les impressions pénibles que l'on ressent lorsqu'on compare l'esprit de décision qui nous vient de l'expérience acquise et les sentiments que nous éprouvons lorsque nous cherchons à préciser les raisons qui nous incitent à l'action.
AUTEUR : Il ne me reste qu'à constater que les pensées qui ont été exprimées par mes honorables interlocuteurs concernent des situations et des époques très différentes. Cependant il y a entre elles quelque chose de commun. Dans un certain sens le drame personnel d'Oblomov se résume dans son incapacité de résoudre la contradiction dialectique entre la virtualité et la réalité. Oblomov a en potentialité beaucoup d'aptitudes, il recèle de nombreuses superpositions de possibilités, mais il n'y a pas d'acte de mesure qui, détruisant ces superposi-

tions, aurait permis à Oblomov d'actualiser une des aptitudes. L'acte étant absent, la superposition demeure et tout reste au point mort.

Passons maintenant à un deuxième exemple littéraire : le conte bien connu de Charles Perrault « Cendrillon ». Donnons la parole à l'auteur en le priant de nous citer l'épisode où la fée apprête Cendrillon pour aller au bal du roi.

PERRAULT : S'il vous plaît.— Eh bien,— dit la fée,— voilà que tu possèdes maintenant ton propre carrosse, et tu peux, sans perdre de temps, aller au bal.

Quand Cendrillon fut tout prête à aller au bal, la fée la fit monter en carrosse et lui recommanda, sur toutes choses, de ne pas passer minuit, l'avertissant que, si elle demeurait au bal un moment davantage, son carrosse redeviendrait citrouille, ses chevaux des souris, ses laquais des lézards et que ses beaux habits reprendraient leur première forme.

AUTEUR : Je vous remercie. Je voudrais faire remarquer que la fée ne donna à Cendrillon des habits et un carrosse que jusqu'à minuit. Et pourquoi pas pour toujours ? Il est évident que la fée aurait pu le faire, mais alors la logique interne, la signification du conte en auraient été corrompues : pour un temps, oui, pour toujours, non.

Est-ce que cela ne vous fait pas penser au modèle des transitions virtuelles ? Les lois de conservation sont enfreintes, les trésors surgissent du néant à l'aide d'une baguette magique, mais tout cela ne peut durer que pendant un intervalle de temps fini — jusqu'à minuit. Après cela Cendrillon retrouve son ancien état, sans ses parures. Comparez maintenant : un système quantique peut passer à un niveau différent de son état initial, sans aucune dépense d'énergie externe, mais le système doit irrémédiablement retourner à son état d'origine. Nous voyons donc Cendrillon effectuer des « transitions virtuelles » entre sa demeure et le palais du roi, y danser, mais bien veiller à ce que le délai prescrit ne soit pas dépassé.

Puis on voit apparaître un gentilhomme portant la pantoufle de vair. Veuillez nous raconter la suite.

PERRAULT : Le gentilhomme qui faisait l'essai de la pantoufle, ayant regardé attentivement Cendrillon et la trouvant fort belle, dit que cela était très juste et qu'il avait l'ordre de l'essayer à toutes les filles. Il fit asseoir Cendrillon et, approchant la pantoufle de son petit pied, il vit qu'il y entrait sans peine, et qu'elle y était juste comme de cire.

Là-dessus arriva la marraine qui, ayant donné un coup de baguette sur les habits de Cendrillon, les fit devenir encore plus magnifiques que tous les autres...

AUTEUR : Ainsi donc la fée rendit cette fois Cendrillon bien parée pour toujours. Les transitions virtuelles ont abouti à une transition réelle de Cendrillon sur un « nouveau niveau ». Le prince, la pantoufle de vair, le gentilhomme, eux tous, ont joué le rôle du photon qui, entrant en interaction avec un système quantique effectuant des transitions virtuelles, provoque une transition réelle. Il va de soi qu'on ne peut sérieusement considérer que ce conte soit une illustration de l'idée des transitions virtuelles, en tant que sauts quantiques. De même, on ne peut considérer le roman « Oblomov » comme illustrant le principe de superposition des états et l'explication des problèmes de la destruction des superpositions lors de l'acte de mesure. Cependant nous pensons avoir le droit de dégager de ces comparaisons une logique interne commune.

BOHR : Je ne pense pas qu'il soit irrévérencieux de remarquer que même un artiste ayant atteint au sommet de son art s'appuie sur une base commune à toute l'humanité, donc sur la même base que celle que nous utilisons nous aussi.

AUTEUR : Sur cet entretien mi-sérieux nous terminons notre étude des fondements physiques de la mécanique quantique. Il est indubitable qu'à de nombreux points de vue les idées de la mécanique quantique sont inusitées et originales. Mais elles ont poussé sur une base solide d'idées et de concepts qui avaient été élaborés par toute l'expérience humaine. Les analogies qu'on peut discerner entre les modèles physiques et les personnages littéraires ne sont donc pas dues au hasard, mais sont parfaitement justifiées.

CHAPITRE III

LES OPÉRATEURS LINÉAIRES EN MÉCANIQUE QUANTIQUE

Quelques remarques préliminaires. Toute théorie physique résulte d'une synthèse de certaines idées physiques (basées sur l'expérience) et d'un certain appareil mathématique. L'élaboration d'une théorie est toujours un processus compliqué faisant apparaître des contradictions, et qui se développe par une suite d'approximations. Néanmoins on discerne dans ce processus contradictoire, tout au moins à ses débuts, une structure logique déterminée, comportant trois étapes successives : 1) l'étape lors de laquelle on formule et on précise le sens des idées de base afin de jeter les fondements physiques de la théorie ; 2) l'étape lors de laquelle on cherche un appareil mathématique adéquat aux idées physiques et permettant de raccorder les deux, ce qui revient à postuler la signification qu'on attache aux différents symboles mathématiques (afin que les relations mathématiques expriment les lois physiques) ; 3) l'étape où l'appareil mathématique revêtu d'une signification physique concrète est mis en œuvre ; les résultats théoriques nouveaux qu'on obtient sont alors vérifiés si possible par l'expérience, ce qui permet d'affiner le contenu physique de la théorie et de perfectionner son appareil mathématique.

A l'époque où apparaît une nouvelle théorie l'appareil mathématique adéquat aux idées physiques peut aussi bien exister que manquer. Lorsque Newton élaborait sa mécanique, il a été obligé d'élaborer un appareil mathématique adéquat ; c'était la méthode des flexions qui, ultérieurement, s'est transformée en calcul différentiel et intégral. Lorsque la mécanique quantique a commencé à se constituer, on disposait en fait d'un appareil mathématique convenable connu sous le nom de *théorie des opérateurs linéaires.*

Dans un article intitulé « Physique quantique et philosophie » N. Bohr écrivait [6] : « *Dans l'appareil de la mécanique quantique on trouve à la place des grandeurs, qui en physique classique caractérisent l'état du système physique, des opérateurs symboliques obéissant à la règle de multiplication non commutative et renfermant la constante de Planck. Ce procédé de formulation permet d'éviter de fixer les valeurs des grandeurs avec la précision requise par les descriptions déterministes*

propres à la physique classique, mais il est suffisant pour déterminer le spectre de répartition de ces mêmes grandeurs, en conformité avec les données dont on dispose pour les processus atomiques. Conformément à l'absence de modèle concret pouvant être associé à l'appareil mathématique, son interprétation physique correspond à des lois de type statistique. » Dans une autre publication [33] Bohr précisait : « *Un instrument adéquat au procédé de description complémentaire est un formalisme mathématique où les équations canoniques de la mécanique classique maintiennent leurs formes, mais où les variables dynamiques sont remplacées par des opérateurs symboliques, régis par les règles de de l'algèbre non commutative.* »

Abordant le côté mathématique de la théorie quantique, nous montrerons comment on incorpore les idées quanto-mécaniques dans l'appareil des opérateurs linéaires, puis, en utilisant des exemples et des problèmes spécialement choisis, nous montrerons la mise en pratique de cet appareil.

§ 17. Fondements de la théorie des opérateurs linéaires

Ce paragraphe est essentiellement consacré aux mathématiques ; on y a rassemblé un certain nombre de questions de la théorie des opérateurs linéaires, ce qui revient à dire qu'on y expose les fondements de l'appareil mathématique qui convient fort bien à l'élaboration de la théorie quantique. Nous attirons l'attention du lecteur sur le fait que les symboles mathématiques introduits dans ce paragraphe n'ont encore aucune signification physique.

Les opérateurs linéaires (définitions de base). On appelle *opérateur* un symbole mathématique qui, agissant sur une fonction, produit une autre fonction. Lorsque'on écrit

$$\hat{L}\psi(x) = \varphi(x) \tag{17.1}$$

cela signifie que l'opérateur $\hat{L}$ agissant sur la fonction $\psi(x)$ produit une nouvelle fonction $\varphi(x)$.

On dit que l'opérateur $\hat{L}$ est *linéaire* s'il satisfait à la condition

$$\hat{L}(\psi_1 + \psi_2) = \hat{L}\psi_1 + \hat{L}\psi_2;\ \hat{L}(a\psi) = a\hat{L}\psi, \tag{17.2}$$

où a est un nombre. Dans ce qui suit nous n'utiliserons que des opérateurs linéaires.

L'action d'un opérateur sur une fonction peut être exprimée sous une forme faisant intervenir une intégrale définie ou une intégrale non propre

$$\hat{L}\psi(x) = \int L(x, y)\,\psi(y)\,dy. \tag{17.3}$$

La quantité $L(x, y)$ porte le nom de *noyau de l'opérateur*. Si la variable varie discrètement, au lieu de (17.3) on aura

$$\hat{L}\psi_n = \sum_m L_{nm}\psi_m. \tag{17.4}$$

L'ensemble de tous les coefficients L_{nm} porte le nom de *matrice de l'opérateur* $\hat{L}$; on dit que l'opérateur est donné dans une représentation matricielle. On peut toujours donner une représentation matricielle d'un opérateur puisque l'on peut toujours considérer le noyau $L(x, y)$ figurant dans (17.3) comme une matrice continue.

Soit $\hat{L}\psi = \varphi$. On dira que $\hat{L}^*$ est l'*opérateur conjugué complexe* de l'opérateur $\hat{L}$ si, le faisant agir sur la fonction ψ^*, on obtient la fonction φ^*:

$$\hat{L}^*\psi^*(x) = \varphi^*(x). \tag{17.5}$$

L'opérateur $\tilde{\hat{L}}$ est dit *opérateur transposé* par rapport à l'opérateur $\tilde{L}$ s'il satisfait à la condition:

$$\int \Psi(x)\,\hat{L}\,\psi(x)\,dx = \int \psi(x)\,\tilde{\hat{L}}\,\Psi(x)\,dx. \tag{17.6}$$

Le noyau d'un opérateur transposé satisfait à la condition

$$\tilde{L}(x, y) = L(y, x), \tag{17.7}$$

et la matrice à la condition

$$\tilde{L}_{nm} = L_{mn}. \tag{17.8}$$

Considérons un opérateur linéaire $\hat{L}$ et commençons par trouver l'opérateur conjugué complexe $\hat{L}^*$ qui lui correspond. Puis trouvons l'opérateur $\tilde{\hat{L}}^*$ qui correspond à $\hat{L}^*$. Cet opérateur transposé est désigné par le symbole L^+; on dit qu'il est *conjugué à* l'opérateur $\hat{L}$.

A l'aide de la notion d'opérateur conjugué on arrive à déterminer deux types importants d'opérateurs linéaires: les opérateurs hermitiens et les opérateurs unitaires. Dans le cas où

$$\hat{L} = \hat{L}^+, \tag{17.9}$$

l'opérateur $\hat{L}$ est dit *opérateur hermitien* (ou *auto-conjugué*). Dans le cas où

$$\hat{L}\hat{L}^+ = \hat{L}^+\hat{L} = 1. \tag{17.10}$$

L'opérateur $\hat{L}$ est dit *opérateur unitaire*. Remarquons qu'en général on désigne les opérateurs unitaires par le symbole $\hat{U}$. La matrice d'un

opérateur unitaire satisfait à la condition

$$\sum_m U_{nm} U^+_{mk} = \delta_{nk}. \tag{17.11}$$

Notons une propriété importante des opérateurs unitaires. Soit $\sum_m U_{nm}\psi_m = \varphi_n$. Il est facile de se rendre compte que

$$\sum_n \varphi^*_n \varphi_n = \sum_m \psi^*_m \psi_m. \tag{17.12}$$

L'équation fondamentale de la théorie des opérateurs linéaires se présente sous la forme suivante

$$\hat{L}\psi = \lambda\psi. \tag{17.13}$$

Les nombres λ pour lesquels l'équation (17.13) a des solutions finies forment un *spectre de valeurs propres* de l'opérateur $\hat{L}$. Le spectre des valeurs propres d'un opérateur peut être continu, discret ou mixte. Les solutions $\psi(x)$ de l'équation (17.13) sont appelées *fonctions propres* de l'opérateur $\hat{L}$. A une certaine valeur propre peuvent correspondre une ou plusieurs fonctions propres. Si à une valeur λ_1 correspondent s fonctions propres linéairement indépendantes, on dit que la valeur λ_1 *est dégénérée* s fois.

Propriétés des opérateurs hermitiens. Nous indiquons ci-dessous trois théorèmes résumant les principales propriétés des opérateurs hermitiens (nous n'en donnons pas les démonstrations).

Premier théorème: L'opérateur ne possède des valeurs propres réelles que dans le cas et uniquement dans le cas où il est hermitien.

Deuxième théorème: Les fonctions propres d'un opérateur hermitien correspondant à différentes valeurs propres sont mutuellement orthogonales.

Soit $\hat{L}\psi_n = \lambda_n\psi_n$. D'après ce théorème, pour $\lambda_n \neq \lambda_m$ on doit avoir

$$\int \psi^*_m(x)\,\psi_n(x)\,dx = 0. \tag{17.14}$$

Comme l'équation (17.13) est homogène, les fonctions propres sont connues à un facteur constant et arbitraire près. Choisissons ce facteur tel que soit remplie la condition de normation

$$\int \psi^*_n(x)\,\psi_n(x)\,dx = 1. \tag{17.15}$$

En combinant (17.14) et (17.15), nous trouvons la condition d'orthonormation des fonctions propres d'un opérateur hermitien

$$\int \psi^*_m(x)\,\psi_n(x)\,dx = \delta_{mn}. \tag{17.16}$$

Si l'opérateur présente un spectre continu, au lieu de (17.16) on aura

$$\int \psi^*_{\lambda'}(x)\,\psi_\lambda(x)\,dx = \delta(\lambda - \lambda'). \tag{17.17}$$

Considérons plus particulièrement le cas où une des valeurs propres est dégénérée s fois. En règle générale, les fonctions propres correspondant à cette valeur propre dégénérée ne sont pas orthonormées. On peut cependant établir s combinaisons linéaires de ces fonctions qui, elles, satisfont à la condition d'orthonormation.

Troisième théorème: Toute fonction limitée peut être développée en série (une intégrale) de fonctions propres de l'opérateur hermitien. Autrement dit, le système de fonctions propres d'un opérateur hermitien est un système fermé (complet).

En utilisant ce dernier théorème, représentons une fonction $\Phi(x)$ sous forme d'une série de fonctions propres $\psi_n(x)$: $\Phi = \sum_n c_n\psi_n$. Pour trouver les c_n, multiplions les deux membres de cette égalité par $\psi^*_m(x)$ et intégrons par rapport à x:

$$\int \psi^*_m(x)\,\Phi(x)\,dx = \sum_n c_n \int \psi^*_m(x)\,\psi_n(x)\,dx.$$

Appliquant (17.16), on en tire

$$\int \psi^*_m(x)\,\Phi(x)\,dx = \sum_n c_n\delta_{mn} = c_m.$$

On trouve ainsi

$$\left.\begin{aligned} &\Phi(x) = \sum_n c_n\psi_n(x), \\ \text{avec}\quad & \\ &c_n = \int \psi^*_n(x)\,\Phi(x)\,dx. \end{aligned}\right\} \tag{17.18}$$

Dans le cas d'un spectre continu on utilisera la condition (17.17) et au lieu de (17.18) on aura

$$\left.\begin{aligned} &\Phi(x) = \int c(\lambda)\,\psi_\lambda(x)\,d\lambda, \\ \text{avec}\quad & \\ &c(\lambda) = \int \psi^*_\lambda(x)\,\Phi(x)\,dx. \end{aligned}\right\} \tag{17.19}$$

Indiquons un résultat particulier qui est une conséquence directe de ce que le système de fonctions propres d'un opérateur hermitien est fermé. Soient $\Phi(x) = \int c(\lambda)\,\psi_\lambda(x)\,d\lambda$ et $\Psi(x) =$

$= \int b(\lambda')\,\psi_{\lambda'}(x)\,d\lambda'$. En utilisant (17.17), on se rend aisément compte que

$$\int \Psi^*(x)\,\Phi(x)\,dx = \int b^*(\lambda)\,c(\lambda)\,d\lambda. \tag{17.20}$$

Les représentations. Soit un opérateur hermitien $\hat{M}$ qui transforme la fonction $\Phi(x)$ en une fonction $\psi(x)$:

$$\Psi(x) = \hat{M}\Phi(x). \tag{17.21}$$

Développons les fonctions Φ et Ψ suivant les fonctions propres $\psi_\lambda(x)$ d'un autre opérateur hermitien (opérateur $\hat{L}$). On supposera que le spectre de l'opérateur $\hat{L}$ est continu. Nous avons donc

$$\Phi(x) = \int c(\lambda)\,\psi_\lambda(x)\,d\lambda;\ \Psi(x) = \int b(\lambda)\,\psi_\lambda(x)\,d\lambda. \tag{17.22}$$

A la transformation (17.21) correspond maintenant une certaine transformation de la fonction $c(\lambda)$ en une fonction $b(\lambda)$. Exprimons cette transformation par

$$b(\lambda) = \hat{M}(\lambda)\,c(\lambda). \tag{17.23}$$

Nous dirons que les expressions (17.21) et (17.23) décrivent une seule et même transformation mais donnée dans des *représentations différentes*. La nature de la transformation est déterminée par les variables dont dépendent les fonctions initiale et finale. Aussi dans le cas de la formule (17.21) on dit qu'on a affaire à une représentation en x, et dans le cas de la formule (17.22) à une représentation en λ (représentation de l'opérateur $\hat{L}$). L'opérateur $\hat{M}$ figurant dans (17.21) est donc l'opérateur de la transformation considérée, défini dans la représentation en x [pour l'expliciter, nous écrirons $\hat{M}(x)$]; quant à l'opérateur $\hat{M}(\lambda)$ figurant dans (17.23), c'est l'opérateur de cette même transformation mais donné dans la représentation en λ.

Voyons maintenant quelle doit être la forme d'un opérateur hermitien donné dans sa *représentation propre*. Soient $\varphi_\mu(x)$ les fonctions propres de l'opérateur $\hat{M}$. Au lieu de (17.22) on écrira dans notre cas

$$\Phi(x) = \int c(\mu)\,\varphi_\mu(x)\,d\mu;$$

$$\Psi(x) = \int b(\mu)\,\varphi_\mu(x)\,d(\mu). \tag{17.24}$$

Faisons agir l'opérateur $\hat{M}(x)$ sur la fonction $\Phi(x)$:

$$\hat{M}(x)\,\Phi(x) = \int c(\mu)\,\hat{M}(x)\,\varphi_\mu(x)\,d\mu = \int \mu c(\mu)\,\varphi_\mu(x)\,d\mu.$$

En identifiant ce dernier résultat avec la seconde égalité (17.24), on trouve

$$b(\mu) = \mu c(\mu). \tag{17.25}$$

Il s'ensuit que

$$\hat{M}(\mu) = \mu. \tag{17.26}$$

Cela montre que dans sa représentation propre l'opérateur hermitien se confond avec ses valeurs propres.

Considérons maintenant un cas général. Supposons connu l'opérateur $\hat{M}(x)$; cherchons la forme de cet opérateur dans la représentation en λ. Utilisant (17.21) et (17.22), nous écrivons

$$\Psi(x) = \hat{M}(x)\Phi(x) = \int c(\lambda')\hat{M}(x)\psi_{\lambda'}(x)\,d\lambda' = \int b(\lambda')\psi_{\lambda'}(x)\,d\lambda'.$$

Multiplions les deux membres de la dernière égalité par $\psi_\lambda^*(x)$ puis intégrons par rapport à x; il vient

$$\int c(\lambda')\left[\int \psi_\lambda^*(x)\hat{M}(x)\psi_{\lambda'}(x)\,dx\right]d\lambda' =$$
$$= \int b(\lambda')\left[\int \psi_\lambda^*(x)\psi_{\lambda'}(x)\,dx\right]d\lambda'.$$

A l'aide de (17.17) nous en tirons

$$b(\lambda) = \int\left[\int \psi_\lambda^*(x)\hat{M}(x)\psi_{\lambda'}(x)\,dx\right]c(\lambda')\,d\lambda'.$$

Enfin, tenant compte de (17.23), nous obtenons en définitive [comparez à (17.3)]:

$$\hat{M}(\lambda)\,c(\lambda) = \int M(\lambda, \lambda')\,c(\lambda')\,d\lambda',$$

avec

$$M(\lambda, \lambda') = \int \psi_\lambda^*(x)\hat{M}(x)\psi_{\lambda'}(x)\,dx. \tag{17.27}$$

Par conséquent, si l'on connaît la forme de l'opérateur, dans la représentation en x, par exemple, pour trouver la matrice de cet opérateur dans la représentation en λ, on devra utiliser les valeurs propres de l'opérateur $\hat{L}$, données dans la représentation en x et appliquer la formule (17.27).

Pour conclure, signalons le cas où les fonctions propres d'un opérateur hermitien sont données dans la représentation d'un autre opérateur. Dans ce cas est valable l'égalité

$$\psi_\lambda(\mu) = \varphi_\mu^*(\lambda). \tag{17.28}$$

Passage d'une représentation à une autre à l'aide d'une transformation unitaire. Pour passer d'une représentation en λ à une repré-

sentation en x, on utilise la formule (17.22). Ecrivons cette formule sous forme opératorielle:

$$\Phi(x) = \hat{U}(x, \lambda)\, c(\lambda); \quad \Psi(x) = \hat{U}(x, \lambda)\, b(\lambda). \tag{17.29}$$

Ecrivons d'autre part

$$\int \Psi^*(x)\, \Phi(x)\, dx = \int \Psi^*(x)\, \hat{U}(x, \lambda)\, c(\lambda)\, dx = \\ = \int c(\lambda)\, [\hat{U}^+(\lambda, x)\, \Psi(x)^*]\, d\lambda.$$

A l'aide de (17.20) on en tire

$$b(\lambda) = \hat{U}^+(\lambda, x)\, \Psi(x).$$

De ce dernier résultat on peut tirer deux conclusions importantes. La première en est

$$\Psi(x) = \hat{U}(x, \lambda)\, b(\lambda) = \hat{U}(x, \lambda)\, \hat{U}^+(\lambda, x)\, \Psi(x)$$

et par suite

$$\hat{U}(x, \lambda)\, \hat{U}^+(\lambda, x) = 1. \tag{17.30}$$

Cela signifie que pour passer d'une représentation à une autre on utilise une transformation unitaire. Deuxièmement, si

$$\Psi(x) = \hat{M}(x)\, \Phi(x), \text{ on a}$$
$$\hat{U}(x, \lambda)\, b(\lambda) = \hat{M}(x)\, \hat{U}(x, \lambda)\, c(\lambda),$$

conformément à (17.30)

$$b(\lambda) = \hat{U}^+(\lambda, x)\, \hat{M}(x)\, \hat{U}(x, \lambda)\, c(\lambda). \tag{17.31}$$

En comparant (17.31) à (17.23), on voit que

$$\hat{M}(\lambda) = \hat{U}^+(\lambda, x)\, \hat{M}(x)\, \hat{U}(x, \lambda). \tag{17.32}$$

Il y a lieu de noter que la multiplication des opérateurs correspond à leur application successive aux fonctions qui se trouvent placées à droite des opérateurs. Dans le présent cas on doit faire agir l'opérateur $\hat{U}(x, \lambda)$ d'abord sur la fonction $c(\lambda)$, ce qui nous donnera la fonction $\Phi(x)$, puis on fera agir l'opérateur $\hat{M}(x)$ sur la fonction $\Phi(x)$, ce qui nous donnera la fonction $\Psi(x)$; enfin on fera agir l'opérateur $\hat{U}^+(\lambda, x)$ sur la fonction $\Psi(x)$.

Les formules (17.29) décrivent donc le passage, effectué à l'aide d'une transformation unitaire, d'une représentation à une autre pour des fonctions, tandis que la formule (17.32) décrit le passage correspondant pour un opérateur.

Les invariants unitaires. On appelle *invariants unitaires* les grandeurs et les propriétés qui ne changent pas lors des transforma-

tions unitaires et qui sont donc indépendantes du choix de la représentation. Au nombre des invariants unitaires appartiennent notamment: a) le caractère hermitien d'un opérateur (si l'opérateur est hermitien dans une représentation donnée, il le sera dans toute autre représentation); b) le spectre des valeurs propres d'un opérateur hermitien; c) la condition d'orthonormation des fonctions propres [ce résultat est précisément reflété par la formule (17.12)]; d) les intégrales telles que $\int \Psi^* (x)\, \Phi (x)\, dx$ [ce résultat découle directement de (17.20)]; e) les intégrales telles que $\int \Psi^* (x)\, \hat{M} (x)\, \Phi (x)\, dx$ ainsi que les intégrales de type plus général $\int \Psi^* (x)\, \hat{M}^n (x)\, \Phi (x)\, dx$, où n est un nombre naturel. Notons que l'invariance unitaire de ces intégrales signifie que sont satisfaites les relations suivantes

$$\int \Psi^* (x)\, \hat{M} (x)\, \Phi (x)\, dx = \int b^* (\lambda)\, \hat{M} (\lambda)\, c (\lambda)\, d\lambda, \qquad (17.33)$$

$$\int \Psi^* (x)\, \hat{M}^n (x)\, \Phi (x)\, dx = \int b^* (\lambda)\, \hat{M}^n (\lambda)\, c (\lambda)\, d\lambda. \qquad (17.34)$$

A titre d'exemple nous allons démontrer la justesse de la relation (17.33). En tenant compte de (17.29) et de (17.32), nous soumettrons le premier membre de (17.33) à des transformations successives:

$$\int [\hat{U}^* b^* (\lambda)]\, \hat{U} \hat{M} (\lambda)\, \hat{U}^+ \hat{U} c (\lambda)\, dx = \int [\hat{U}^* b^* (\lambda)]\, \hat{U} M (\lambda)\, c (\lambda)\, dx =$$

$$= \int b^* (\lambda)\, \hat{U}^+ \hat{U} \hat{M} (\lambda)\, c (\lambda)\, d\lambda = \int b^* (\lambda)\, \hat{M} (\lambda)\, c (\lambda)\, d\lambda.$$

Nous voyons qu'en fin de compte nous retrouvons le second membre de (17.33), et c'est ce qu'il fallait démontrer.

Commutation des opérateurs et existence de systèmes de fonctions propres communes. On dit que deux opérateurs $\hat{L}$ et $\hat{M}$ sont *commutatifs* si pour toute fonction limitée $\Phi (x)$ se trouve satisfaite l'égalité

$$\hat{M} \hat{L} \Phi (x) = \hat{L} \hat{M} \Phi (x). \qquad (17.35)$$

Si on arrive à trouver ne serait-ce qu'une seule fonction ne satisfaisant pas à l'égalité (17.35), on dira que les opérateurs $\hat{L}$ et $\hat{M}$ ne sont pas commutatifs. Le symbole $[\hat{M}, \hat{L}] = \hat{M}\hat{L} - \hat{L}\hat{M}$ est appelé le *commutateur des opérateurs* $\hat{L}$ et $\hat{M}$. Si les opérateurs sont commutatifs, cette propriété s'exprime par $[\hat{M}, \hat{L}] = 0$.

Considérons le *théorème*: si les opérateurs $\hat{L}$ et $\hat{M}$ ont des fonctions propres communes et que celles-ci forment un système fermé, les opérateurs sont commutatifs. Démontrons ce théorème.

Désignons par $\psi_{\lambda\mu}(x)$ les fonctions propres communes aux opérateurs $\hat{L}$ et $\hat{M}$ (l'indice double $\lambda\mu$ consigne le fait que ces fonctions propres sont communes aux deux opérateurs). Il est évident que

$$\hat{M}\hat{L}\psi_{\lambda\mu} = \lambda\hat{M}\psi_{\lambda\mu} = \lambda\mu\psi_{\lambda\mu},$$

$$\hat{L}\hat{M}\psi_{\lambda\mu} = \mu\hat{L}\psi_{\lambda\mu} = \mu\lambda\psi_{\lambda\mu}.$$

Il en résulte que

$$(\hat{M}\hat{L} - \hat{L}\hat{M})\,\psi_{\lambda\mu} = 0,$$

et puisque l'on sait que les fonctions $\psi_{\lambda\mu}(x)$ forment un système fermé, il s'ensuit que pour toute fonction $\Phi(x)$ on doit avoir

$$(\hat{M}\hat{L} - \hat{L}\hat{M})\,\Phi(x) = \sum c_{\lambda\mu}(\hat{M}\hat{L} - \hat{L}\hat{M})\,\psi_{\lambda\mu}(x) = 0.$$

Et c'est ce qu'il fallait démontrer.

Notons bien qu'il importe que les fonctions propres communes à des opérateurs doivent former un système fermé. Il peut arriver que deux opérateurs ne possèdent qu'une seule fonction propre qui soit commune aux deux. On ne peut alors conclure à leur commutativité.

Le théorème que nous venons de démontrer indique que la commutation des opérateurs est une condition nécessaire à ce que les opérateurs aient un système commun de fonctions propres. On peut se poser la question si la condition évoquée est suffisante? La réponse à cette question sera affirmative dans le cas où les valeurs propres des opérateurs ne sont pas dégénérées. Mais dans un cas plus général, où la dégénérescence n'est pas exclue, est valable le *théorème* suivant: si les opérateurs $\hat{L}$ et $\hat{M}$ sont commutatifs, on peut toujours trouver des fonctions propres qui leur soient communes. Supposons, par exemple, que la valeur propre λ_1 soit dégénérée s fois. Parmi les s solutions de l'équation $\hat{L}\psi = \lambda_1\psi$ on peut choisir s combinaisons linéaires qui seront simultanément des fonctions propres de l'opérateur $\hat{M}$. En général, à chaque valeur λ_1 correspondent s valeurs propres différentes de l'opérateur $\hat{M}$.

Notre incursion dans les mathématiques « pures » prend fin là-dessus. Ces notions sont amplement suffisantes pour pouvoir utiliser l'appareil des opérateurs linéaires sans avoir à se référer à des ouvrages spécialisés.

§ 18. De la matrice de Hamilton à l'opérateur de l'énergie

Rôle du choix des états de base. Reprenons l'équation (12.8) que nous avons établie au paragraphe 12. On y faisait choix d'un système d'états de base de la microparticule $\{\langle i\,|\}$; un état quelconque $\langle s(t)\,|$ que présentait la microparticule à un instant t pouvait alors être représenté par une superposition des états de base qui avai-

ent été choisis:

$$\langle s(t)| = \sum_i \langle s(t)|\, i\rangle \langle i|. \tag{18.1}$$

Nous avons désigné les amplitudes $\langle s(t) \mid i\rangle$ par $C_i(t)$ et nous avons démontré que ces amplitudes satisfaisaient à l'équation

$$-i\hbar \frac{d}{dt} C_i(t) = \sum_j H_{ij}(t) C_j(t), \tag{18.2}$$

qui permet, connaissant à un instant donné t les amplitudes $C_i(t)$ et la matrice de Hamilton $H_{ij}(t)$, de calculer les amplitudes C_i à tout instant ultérieur.

L'expression (18.1) montre bien que les amplitudes $C_i(t)$ dépendent du choix du système d'états de base $\{\langle i|\}$. Supposons que le besoin se fait sentir de passer à un autre système d'états de base $\{\langle m|\}$. Pour ce faire, nous commencerons par présenter les anciens états de base sous la forme d'une superposition des nouveaux états de base

$$\langle i| = \sum_m \langle i \mid m\rangle \langle m|. \tag{18.3}$$

Substituons maintenant cette superposition dans (18.1); nous obtenons

$$\langle s(t)| = \sum_i \sum_m C_i(t) \langle i \mid m\rangle \langle m|,$$

ou bien

$$\langle s(t)| = c_m(t) \langle m|, \tag{18.4}$$

avec

$$c_m(t) = \sum_i C_i(t) \langle i \mid m\rangle. \tag{18.5}$$

Les nouvelles amplitudes $c_m(t)$ correspondant au système d'états de base $\{\langle m|\}$ doivent naturellement satisfaire à une équation telle que (18.2), mais avec une nouvelle matrice de Hamilton $H_{mn}(t)$:

$$-i\hbar \frac{d}{dt} c_m(t) = \sum_n H_{mn}(t) c_n(t). \tag{18.6}$$

Nous allons montrer comment on arrive à exprimer l'ancienne matrice à l'aide de la nouvelle. En portant (18.5) dans (18.6), il vient

$$-i\hbar \frac{d}{dt} \sum_{j'} C_{j'}(t) \langle j' \mid m\rangle = \sum_n \sum_j H_{mn}(t) C_j(t) \langle j \mid n\rangle.$$

Multiplions les deux membres de cette dernière égalité par $\langle m \mid i \rangle$, puis sommons par rapport à m:

$$-i\hbar \frac{d}{dt} \sum_{j'} C_{j'}(t) \Big[\sum_{m} \langle j' \mid m \rangle \langle m \mid i \rangle \Big] =$$

$$= \sum_{j} \Big[\sum_{n} \sum_{m} H_{mn}(t) \langle j \mid n \rangle \langle m \mid i \rangle \Big] C_j(t).$$

En remarquant que $\sum_m \langle j' \mid m \rangle \langle m \mid i \rangle = \langle j' \mid i \rangle = \delta_{j'i}$, nous pouvons simplifier le second membre, ce qui nous donne

$$-i\hbar \frac{d}{dt} C_i(t) = \sum_{j} H_{ij}(t) C_j(t),$$

où

$$H_{ij}(t) = \sum_{n} \sum_{m} H_{mn}(t) \langle j \mid n \rangle \langle m \mid i \rangle. \tag{18.7}$$

Cela montre que la forme des amplitudes satisfaisant à l'équation (12.8) ainsi que celle de la matrice de Hamilton dépendent du choix du système d'états de base.

Nous avons indiqué au paragraphe 13 qu'en règle générale on choisit le système d'états de base de telle sorte que ces états de base aient une signification physique évidente. Cependant dans de nombreux cas, pour faciliter l'étude de l'équation (12.8) on passe à des états de base spécialement choisis à cet effet. Ainsi, par exemple, au paragraphe 13 nous avons motivé le passage des états de base $\langle 1 \mid$ et $\langle 2 \mid$ aux états de base $\langle \mathrm{I} \mid$ et $\langle \mathrm{II} \mid$ par le besoin de diagonaliser la matrice de Hamilton; tandis qu'au paragraphe 14 la motivation invoquée était de mettre la matrice de Hamilton sous une forme mieux adaptée à révéler l'analogie avec le comportement de l'électron dans un champ magnétique.

Transformation de l'équation exprimant le principe de causalité à une forme indépendante du choix des états de base. Introduisons l'opérateur $\hat{H}(t)$ de telle manière que soit satisfaite l'égalité

$$H_{ij}(t) = \langle j \mid \hat{H}(t) \mid i \rangle. \tag{18.8}$$

L'opérateur $\hat{H}(t)$ agissant sur l'état de base $\langle i \mid$ fait apparaître un autre état $\langle \psi(t) = \hat{H}(t) \mid i \rangle$ qui n'est plus un état de base. L'élément $H_{ij}(t)$ de la matrice de Hamilton joue ici le rôle de l'amplitude $\langle j \mid \psi(t) \rangle$, donc le rôle de l'amplitude de la probabilité exprimant que la microparticule se trouvant dans l'état de base $\langle j \mid$ peut être décelée dans un état $\langle \psi(t) \mid$.

En portant (18.8) dans (18.2) on obtient

$$-i\hbar \frac{d}{dt} \langle s(t) \mid i \rangle = \sum_{j} \langle s(t) \mid j \rangle \langle j \mid H(t) \mid i \rangle. \tag{18.9}$$

ou encore

$$-i\hbar \frac{d}{dt} \langle s(t) | i \rangle = \langle s(t) | \hat{H}(t) | i \rangle. \tag{18.10}$$

Passons à l'égalité conjuguée complexe en tenant compte de (9.33) et (12.9); on obtient

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle i \mid s(t) \rangle = \langle i | \hat{H}(t) | s(t) \rangle \tag{18.11}$$

ou

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mid s(t) \rangle = \hat{H}(t) | s(t) \rangle. \tag{18.12}$$

Remarquons que pour passer de (18.9) à (18.10) ainsi que pour passer de (18.11) à (18.12) nous avons appliqué les règles que nous avons groupées au paragraphe 10 sous le nom de « mécanisme de la mécanique quantique ». L'équation (18.12) est analogue à l'équation (18.2), mais à la différence de cette dernière, elle est indépendante du choix des états de base.

Analogie vectorielle. Dans ce qui précède, pour exprimer en langage mathématique la relation de causalité [équation (18.2)], nous avons été obligés d'utiliser les données concernant l'état considéré, la nature physique du problème et les états de base. Maintenant nous disposons de données suffisantes concernant l'état considéré et la nature du problème [équation (18.12)]. Cela signifie qu'en passant de (18.2) à (18.12) nous sommes passés à un niveau d'abstraction plus poussé.

Soulignons une nouvelle fois que la possibilité même d'atteindre à un tel degré d'abstraction est liée à la mise en œuvre de la notion d'opérateur. Ce sont précisément les opérateurs qui permettent d'arriver à des corrélations quanto-mécaniques suffisamment abstraites pour *être indépendantes* du choix du système d'états de base.

Le passage à un plus haut degré d'abstraction, déterminé par l'introduction des opérateurs, est analogue à celui où l'introduction de la notion de vecteur a également rehaussé le degré d'abstraction. Examinons de plus près cette analogie.

Remarquons tout d'abord que cette analogie n'est nullement inattendue. Rappelons qu'au paragraphe 14 il a été suggéré que l'on peut considérer un état comme un vecteur rapporté à un espace fictif; nous y avons introduit également les amplitudes de projection.

L'idée qui préside à l'étude de l'*analogie vectorielle* est la suivante. On sait que pour effectuer des opérations avec les projections d'un vecteur, on doit dans chaque cas faire choix d'un système de coordonnées convenable. En regard de ce choix de coordonnées en mécanique quantique on doit faire choix d'un système d'états de base. Lorsqu'on utilise des vecteurs on peut opérer avec les grandeurs vectorielles sans avoir à fixer un système de coordonnées. De même

en mécanique quantique l'utilisation de vecteurs d'états et des opérateurs qui agissent sur eux permet de se libérer du choix d'un système d'états de base. Nous illustrerons cette analogie vectorielle en considérant le schéma suivant:

Formule quanto-mécanique	Analogie vectorielle
$\sum_i \langle f \mid i \rangle \langle i \mid s \rangle = 0$	$\sum_i a_i b_i = 0$
$\langle f \mid s \rangle = 0$	$(\vec{a}\,\vec{b}) = 0$
(états mutuellement orthogonaux)	(vecteurs orthogonaux)
$i\hbar \frac{d}{dt} \langle i \mid s(t) \rangle = \sum_j H_{ji} \langle j \mid s(t) \rangle$	$c_i = \sum_j H_{ij} a_j$
$i\hbar \frac{d}{dt} \mid s(t) \rangle = \hat{H} \mid s(t) \rangle$	$\vec{c} = \hat{H}\vec{a}$
(opérations sur états)	(opérations sur vecteurs)

Dans chacune des cases du schéma on donne deux formules ayant la même signification (précisée entre parenthèses). Les formules se trouvant en haut dépendent du choix d'un système d'états de base ou d'un système de coordonnées, tandis que les formules qui se trouvent en bas n'en dépendent pas.

Donnons un exemple concret pour la case inférieure de droite du schéma ci-dessus. On y indique la manière dont un opérateur agit sur un vecteur. L'exemple que nous choisirons (et auquel on ne doit attribuer aucune signification quanto-mécanique) concerne le cas où la matrice H_{ij} est de la forme

$$(H) = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{\partial}{\partial r_3} & \frac{\partial}{\partial r_2} \\ \frac{\partial}{\partial r_3} & 0 & -\frac{\partial}{\partial r_1} \\ -\frac{\partial}{\partial r_2} & \frac{\partial}{\partial r_1} & 0 \end{pmatrix},$$

où r_1, r_2, r_3 sont les trois coordonnées cartésiennes. Dans ce cas la relation $\vec{c} = \hat{H}\vec{a}$, s'écrit sous une forme bien connue: $\vec{c} = \operatorname{rot} \vec{a}$.

Pour conclure, nous voulons préciser certains aspects de l'analogie vectorielle: a) à la fixation d'un système d'états de base correspond la fixation d'un système de coordonnées, b) au passage d'un système d'états de base à un autre correspond le passage d'un système

de coordonnées à un autre (notons que ce passage d'un système à un autre n'altère nullement le contenu physique du problème à l'étude), c) à une décomposition suivant les états de base correspond une représentation du vecteur au moyen de ses projections sur les axes de coordonnées. L'analogie avec les vecteurs constitue un bon exemple du cas où on peut faire abstraction des conditions accessoires et mettre les relations marquantes sous une forme ne tenant compte que des facteurs physiques.

Energie moyenne. Nous voulons montrer les facilités que fait apparaître la généralité de l'approche opératorielle et pour cela nous allons calculer la valeur moyenne $\langle E \rangle$ de l'énergie d'une microparticule se trouvant dans l'état $\langle s \mid$. Soient $\{\langle i \mid\}$ les états de base d'énergies E_i. Il en découle (cf. § 13) que la matrice de Hamilton est diagonale, ce qui permet d'écrire

$$\langle j \mid \hat{H} \mid i \rangle = \delta_{ij} E_i,$$

ou encore

$$\langle j \mid \hat{H} \mid i \rangle = \langle j \mid i \rangle E_i. \tag{18.13}$$

Décomposons l'état $\langle s \mid$ suivant le système d'états de base $\{\langle i \mid\}$: : $\langle s \mid = \sum_i \langle s \mid i \rangle \langle i \mid$ et cherchons à calculer l'énergie moyenne $\langle E \rangle$ à l'aide d'une formule telle que (12.3)

$$\langle E \rangle = \sum_i |\langle s \mid i \rangle|^2 E_i. \tag{18.14}$$

Compte tenu de (9.33) on réécrit (18.14) sous la forme

$$\langle E \rangle = \sum_i \langle s \mid i \rangle E_i \langle i \mid s \rangle \equiv \langle s \mid \varphi \rangle, \tag{18.15}$$

avec

$$\mid \varphi \rangle = \sum_i \mid i \rangle E_i \langle i \mid s \rangle. \tag{18.16}$$

Il résulte de (18.13) que

$$\hat{H} \mid i \rangle = \mid i \rangle E_i. \tag{18.17}$$

En portant (18.17) dans (18.16) on trouve

$$\mid \varphi \rangle = \sum_i \hat{H} \mid i \rangle \langle i \mid s \rangle = \hat{H} \mid s \rangle,$$

et de (18.15) on tire alors l'énergie moyenne

$$\langle E \rangle = \langle s \mid \hat{H} \mid s \rangle. \tag{18.18}$$

Cette dernière formule montre que l'énergie moyenne d'une microparticule se trouvant dans l'état $\langle s \mid$ s'exprime par le seul opérateur $\hat{H}$, les états de base n'y figurant pas.

La mise en œuvre de (18.18) est d'un emploi commode puisqu'elle ne dépend pas du choix des états de base ; on peut donc effectuer des calculs concrets en adoptant tout système d'états de base qui paraît commode. Supposons, par exemple, qu'il soit commode d'utiliser les états de base $\{\langle m \mid\}$. La relation opératorielle (18.18) se laisse aussitôt écrire sous la forme suivante

$$\langle E \rangle = \sum_m \sum_n \langle s \mid m \rangle \langle m \mid \hat{H} \mid n \rangle \langle n \mid s \rangle. \tag{18.19}$$

L'opérateur de l'énergie (le hamiltonien) .Nous avons déjà fait remarquer que la matrice de Hamilton aurait pu être appelée matrice de l'énergie (rappelons que les éléments d'une matrice de Hamilton diagonalisée représentent les valeurs que peut prendre l'énergie de la microparticule). La corrélation entre l'opérateur $\hat{H}$ et la matrice de Hamilton conjointement avec la formule (18.18) exprimant la valeur moyenne de l'énergie en fonction de l'opérateur $\hat{H}$ suffit pour désigner l'opérateur $\hat{H}$ sous le nom d'*opérateur de l'énergie*. Dans la littérature scientifique on appelle *hamiltonien* l'opérateur $\hat{H}$.

Récapitulons les expressions ci-dessus renfermant le hamiltonien de la microparticule (le lecteur voudra bien remarquer toute l'importance de ces formules) :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mid s(t)\rangle = \hat{H} \mid s(t)\rangle, \tag{18.12}$$

$$\langle E \rangle = \langle s \mid \hat{H} \mid s \rangle, \tag{18.18}$$

$$\hat{H} \mid f \rangle = \mid f \rangle E. \tag{18.20}$$

Dans (18.20) le symbole $\langle f \mid$ désigne un état stationnaire et E l'énergie de cet état stationnaire.

Notons encore que le hamiltonien (de même que tout autre opérateur) peut agir non seulement sur un état $\langle s \mid$ mais encore sur l'amplitude $\langle i \mid s \rangle$ de cet état, puisque l'on peut toujours écrire [cf. (17.4)] :

$$\hat{H} C_i(t) = \sum_j H_{ij} C_j(t). \tag{18.21}$$

En utilisant (18.21) et en remarquant que $\langle i \mid s \rangle = C_i^*$, nous pouvons mettre (18.2) sous une forme en tout point identique à (18.12)

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle i \mid s(t)\rangle = \hat{H} \langle i \mid s(t)\rangle. \tag{18.22}$$

Par suite, (18.20) se laisse écrire comme suit

$$\hat{H} \langle i \mid f \rangle = E \langle i \mid f \rangle. \tag{18.23}$$

§ 19. Les opérateurs linéaires en mécanique quantique

Abordons maintenant le thème central de ce chapitre et montrons quelle signification physique on doit attacher aux symboles de l'appareil mathématique de la théorie des opérateurs linéaires pour en faire l'appareil de la mécanique quantique. De ce point de vue le paragraphe précédent doit être considéré comme un préliminaire à cet objectif.

Rôle que jouent les opérateurs en mécanique quantique. En ce qui concerne le rôle que jouent les opérateurs en mécanique quantique on doit tenir compte des circonstances suivantes.

Premièrement, en mécanique quantique on fait correspondre à toute variable dynamique (coordonnée spatiale, énergie, impulsion, moment, etc.) un certain opérateur hermitien.

Deuxièmement, pour passer d'une représentation à une autre, sans que la signification physique du problème en soit altérée, on utilise les opérateurs unitaires.

Examinons la signification de la première de ces circonstances. Cela revient à affirmer qu'à côté de l'opérateur de l'énergie $\hat{H}$ on doit introduire d'autres « opérateurs physiques », tels que l'opérateur de la coordonnée $\hat{\vec{r}}$, l'opérateur de l'impulsion $\hat{\vec{p}}$, l'opérateur du moment $\hat{\vec{M}}$, etc. Il est fort important qu'on arrive parfaitement à incorporer dans la mécanique quantique les corrélations dynamiques de la mécanique classique en maintenant leur forme, *à condition d'y substituer à la place des grandeurs physiques qui y figurent les opérateurs hermitiens convenables.* Autrement dit, l'appareil de la mécanique quantique peut être établi par analogie avec l'appareil de la mécanique classique si on y remplace les grandeurs physiques par les opérateurs hermitiens correspondants. Comparons à titre d'exemple les formules suivantes:

Mécanique classique	Mécanique quantique	
$E=\frac{p^2}{2m}+U$	$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\hat{U}$	(19.1)
$\vec{M}=(\vec{r}\times\vec{p})$	$\hat{\vec{M}}=(\hat{\vec{r}}\times\hat{\vec{p}})$	(19.2)

On doit cependant tenir compte de ce qu'il n'existe pas d'analogie formelle parfaite entre les appareils de la mécanique classique et de la mécanique quantique. On remarquera que les opérations algébriques auxquelles on soumet les corrélations entre opérateurs présentent

la particularité de ce que les opérateurs ne peuvent commuter (plus en détail voir § 20). Ainsi, dans le cas où $\hat{A}$ et $\hat{B}$ ne sont pas commutatifs $(\hat{A} + \hat{B})^2 \neq \hat{A}^2 + 2\hat{A}\hat{B} + \hat{B}^2$, et au lieu de cela on a $(\hat{A} + \hat{B})^2 = \hat{A}^2 + \hat{A}B + \hat{B}\hat{A} + \hat{B}^2$. D'autre part, on trouve en mécanique quantique des opérateurs n'ayant pas d'analogues classiques (par exemple, l'opérateur de spin).

Tout formellement les opérateurs peuvent être mis en correspondance avec toutes les variables dynamiques, y compris celles qui n'ont aucun sens dans le microcosme. Ainsi on peut introduire l'opérateur de vitesse $\hat{\vec{v}}$, l'opérateur d'énergie potentielle $\hat{U}$, l'opérateur d'énergie cinétique $\hat{T}$, etc., bien que ni la vitesse ni la subdivision usuelle en mécanique classique de l'énergie totale en énergies potentielle et cinétique n'aient aucun sens dans le cas de microparticules.

Principaux postulats. Voyons comment on fait pour faire correspondre un opérateur hermitien à une grandeur physique ; cela revient à se demander ce que signifie l'expression « faire correspondre » ; la réponse en est fournie par deux postulats fondamentaux.

Postulat 1. Lorsqu'on fait correspondre un opérateur $\hat{L}$ à une grandeur physique l, cela veut dire que l'on identifie les valeurs propres λ de l'opérateur aux valeurs que la grandeur physique peut prendre lors des mesures.

Postulat 2. Lorsqu'on fait correspondre un opérateur $\hat{L}$ à une grandeur physique l, cela signifie que l'on identifie les fonctions propres $\psi_\lambda(\alpha)$ de l'opérateur aux fonctions propres de l'ensemble λ donné dans la représentation en α. En tenant compte des remarques que nous avons faites au § 15, cela signifie que les fonctions propres $\psi_\lambda(\alpha)$ de l'opérateur sont identifiées aux amplitudes des états $\langle\lambda \mid \alpha\rangle$ qu'on appelle couramment des fonctions d'onde.

Il en résulte que l'analyse de l'équation fondamentale de la théorie des opérateurs linéaires [cf. (17.13)]

$$\hat{L}(\alpha)\ \langle\lambda \mid \alpha\rangle = \lambda\ \langle\lambda \mid \alpha\rangle \tag{19.3}$$

comporte l'étude de problèmes physiques tels que la détermination du spectre des valeurs possibles λ d'une grandeur physique l et celle des amplitudes d'états $\langle\lambda \mid \alpha\rangle$ avec lesquels se trouvant actualisées les valeurs λ correspondantes.

Appliquée à l'opérateur d'énergie, l'équation (19.3) nous conduit à (18.23). L'étude de l'équation (18.23) permet de trouver les valeurs possibles de l'énergie de la microparticule ainsi que les amplitudes des états stationnaires répondant à ces valeurs de l'énergie.

Les résultats mathématiques et leur signification physique. A l'aide des postulats énoncés ci-dessus on arrive à raccorder les aspects physique et mathématique de l'étude ; ces postulats confèrent aux sym-

boles et aux conclusions mathématiques un contenu physique bien déterminé. Illustrons ces affirmations par différentes remarques.

1. Les valeurs propres d'un opérateur hermitien sont des quantités réelles. Physiquement cela signifie que les valeurs des grandeurs mesurées sont réelles.

2. Le spectre des valeurs propres d'un opérateur hermitien peut être aussi bien discret que continu. Cela correspond soit à une *quantification*, soit à une *variation continue* des grandeurs physiques caractérisant la microparticule.

3. Les fonctions propres d'un opérateur hermitien satisfont à la condition d'orthonormation. Ce résultat mathématique s'exprime par la condition d'orthonormation des fonctions propres des grandeurs physiques et notamment par la condition d'orthogonalité des états de base de la microparticule. Autrement dit, le résultat mathématique (17.16) se retrouve dans les corrélations physiques (15.13) et (10.8), et le résultat mathématique (17.17) dans la corrélation physique (15.14).

4. Le système de fonctions propres d'un opérateur hermitien est un système fermé (complet). Physiquement cela entraîne que toute amplitude peut être décomposée suivant des amplitudes qui sont des fonctions propres de la grandeur physique (donc suivant les amplitudes de base). On peut dire que le caractère mathématique fermé du système de fonctions propres d'un opérateur hermitien se transforme en *principe de superposition des états.*

5. Les valeurs propres d'un opérateur hermitien peuvent être dégénérées. Du point de vue physique cela signifie qu'une seule et même valeur d'une grandeur physique peut être réalisée dans plusieurs états différents.

6. Le résultat mathématique (17.28) concernant les fonctions propres des opérateurs correspond au résultat physique (9.33) concernant les amplitudes des états.

7. Les transformations unitaires déterminant le passage d'un procédé de représentation à un autre correspondent en physique au passage d'un certain ensemble complet de grandeurs physiques à un autre, notamment d'un système d'états de base de la microparticule à un autre système.

8. L'existence d'un système fermé des fonctions propres commun à tous les opérateurs signifie que ces opérateurs sont commutatifs. Ce fait mathématique est lié au fait physique que les grandeurs correspondantes sont *simultanément mesurables.* Notons que du fait que des grandeurs telles que les coordonnées et l'impulsion de la microparticule ne peuvent être simultanément mesurées, il s'ensuit que les opérateurs de la coordonnée et de l'impulsion ne sont pas commutatifs entre eux.

9. Le fait mathématique que le hamiltonien $\hat{H}$ et l'opérateur $\hat{L}$ sont commutatifs signifie en physique que la grandeur l correspondant

à l'opérateur $\hat{L}$ est une intégrale de mouvement, c'est-à-dire que la condition

$$[\hat{H}, \hat{L}] = 0$$

s'exprime en physique par la *loi de conservation* de la grandeur l.

Nous démontrerons avec toute la rigueur nécessaire cette dernière affirmation, mais il est tout indiqué de donner quelques considérations qualitatives qui la confirment. Si les opérateurs $\hat{H}$ et $\hat{L}$ commutent entre eux, les grandeurs E et l sont susceptibles d'être simultanément mesurables, puisqu'il existe des états dans lesquels ces deux grandeurs ont des valeurs bien déterminées. L'état dans lequel l'énergie a une valeur bien déterminée est un état stationnaire, donc un état qui subsiste aussi longtemps que l'on veut. Mais alors doit subsister pendant un temps indéfini la grandeur l, ainsi que toute autre grandeur physique pour laquelle l'état considéré est une fonction propre.

Valeur moyenne d'une grandeur physique. Si l'on mesure la grandeur l dans un état défini par l'amplitude $\langle\lambda|\alpha\rangle$, d'après les postulats fondamentaux cette mesure doit fournir la valeur λ. Supposons maintenant qu'on mesure la grandeur l non dans son état « propre » mais dans un autre état défini par exemple par l'amplitude $\Phi_s(\alpha) = \langle s \mid \alpha\rangle$. On sait que dans ce cas le résultat obtenu dans une seule mesure ne peut être prévu de manière univoque. Des probabilités se mettent alors en jeu et permettent de trouver une *valeur moyenne* $\langle\lambda\rangle$ déduite d'un grand nombre de mesures (cf. § 12). Nous allons démontrer qu'on peut calculer la valeur moyenne $\langle\lambda\rangle$ dans un état $\langle s \mid$ (connaissant l'opérateur hermitien $\hat{L}$ correspondant à la grandeur l). Notons que dans le cas particulier où la grandeur l était l'énergie, ce problème a déjà été résolu au § 18 avec le résultat suivant

$$\langle E\rangle = \langle s \mid \hat{H} \mid s\rangle. \tag{18.18}$$

Dans le cas général (en supposant, pour être concret, que la variable α caractérisant la représentation choisie varie de manière continue), le résultat (18.18) se présente sous la forme suivante

$$\langle\lambda\rangle = \int \Phi_s^*(\alpha)\,\hat{L}(\alpha)\,\Phi_s(\alpha)\,d\alpha. \tag{19.4}$$

Démontrons-le.

Décomposons les amplitudes $\Phi_s(\alpha)$ et $\Phi_s^*(\alpha)$ suivant les fonctions propres $\psi_n(\alpha) = \langle\lambda_n \mid \alpha\rangle$ de l'opérateur $\hat{L}$ (nous supposerons que le spectre de l'opérateur $\hat{L}$ est discret) :

$$\Phi_s(\alpha) = \sum_n \langle s \mid \lambda_n\rangle\,\psi_n(\alpha),$$

$$\Phi_s^*(\alpha) = \sum_m \langle s \mid \lambda_m\rangle^*\psi_m^*(\alpha).$$

En substituant ces superpositions dans (19.4) et en tenant compte de (19.3) et de (17.16), on obtient

$$\int \Phi_s^*(\alpha)\,\hat{L}(\alpha)\,\Phi_s(\alpha)\,d\alpha =$$

$$= \sum_n \sum_m \langle s \mid \lambda_n\rangle \langle s \mid \lambda_m\rangle^* \int \psi_m^*(\alpha)\,\hat{L}(\alpha)\,\psi_n(\alpha)\,d\alpha =$$

$$= \sum_n \sum_m \langle s \mid \lambda_n\rangle \langle s \mid \lambda_m\rangle^* \lambda_n \int \psi_m^*(\alpha)\,\psi_n(\alpha)\,d\alpha =$$

$$= \sum_n \sum_m \langle s \mid \lambda_n\rangle \langle s \mid \lambda_m\rangle^* \lambda_n \delta_{mn} = \sum_n |\langle s \mid \lambda_n\rangle|^2 \lambda_n.$$

Compte tenu de (12.3), cette dernière somme représente précisément $\langle\lambda\rangle$ et c'est ce que nous voulions démontrer.

La formule (19.4) est un résultat de grande importance, suffisant pour illustrer toute la valeur de l'idée des opérateurs en mécanique quantique.

En complète analogie avec (18.18) le résultat (19.4) se laisse écrire sous une forme plus abstraite ne nécessitant plus la fixation d'une représentation concrète

$$\langle\lambda\rangle = \langle s \mid \hat{L} \mid s\rangle. \tag{19.5}$$

Variation dans le temps de la valeur moyenne d'une grandeur. Mettant en œuvre (19.5) et en posant d'abord que l'opérateur $\hat{L}$ est indépendant du temps, on écrira

$$\frac{d}{dt}\langle\lambda\rangle = \frac{d}{dt}\langle s(t) \mid \hat{L} \mid s(t)\rangle =$$

$$= \left(\frac{d}{dt}\langle s(t) \mid\right) \mid \hat{L} \mid s(t)\rangle + \langle s(t) \mid \hat{L} \mid \left(\frac{d}{dt} \mid s(t)\rangle\right). \tag{19.6}$$

Reprenons maintenant la formule (18.12) et mettons-la sous la forme

$$-i\hbar\frac{d}{dt}\langle s(t) \mid = \langle s(t) \mid \hat{H}^+.$$

En tenant compte que le hamiltonien est un opérateur hermitien, on écrira

$$-i\hbar\frac{d}{dt}\langle s(t) \mid = \langle s(t) \mid \hat{H}. \tag{19.7}$$

En portant (18.12) et (19.7) dans (19.6) on obtient

$$\frac{d}{dt}\langle\lambda\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle s(t) \mid \hat{H}\hat{L} - \hat{L}\hat{H} \mid s(t)\rangle,$$

ou bien

$$\frac{d}{dt}\langle\lambda\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle s \mid [\hat{H}, \hat{L}] \mid s\rangle. \tag{19.8}$$

Si la grandeur l est une intégrale de mouvement, on doit avoir $\frac{d}{dt}\langle\lambda\rangle = 0$. Il s'ensuit de (19.8) que la condition de conservation de la grandeur l est la condition citée plus haut $[\hat{H}, \hat{L}] = 0$.

Introduisons un nouvel opérateur $\hat{\dot{L}}$ que nous définirons à l'aide de la relation suivante

$$\langle s \mid \hat{\dot{L}} \mid s\rangle = \frac{d}{dt}\langle\lambda\rangle. \tag{19.9}$$

En comparant (19.9) à (19.8), nous voyons que dans le cas où l'opérateur $\hat{L}$ ne dépend pas du temps l'opérateur $\hat{\dot{L}}$ doit être de la forme

$$\hat{\dot{L}} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{L}]. \tag{19.10}$$

Dans le cas où $\hat{L}$ dépend du temps, au lieu de (19.10) on aura

$$\hat{\dot{L}} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{L}] + \frac{\partial}{\partial t}\hat{L}. \tag{19.11}$$

Invariance unitaire des résultats physiques. Il va de soi que la signification physique d'un certain résultat ne peut dépendre de la représentation utilisée. Cela veut dire que la signification physique d'un résultat ne doit pas se modifier lorsqu'on passe d'une représentation à une autre. Comme pour passer d'une représentation à une autre on utilise les transformations unitaires, cela signifie que *les résultats physiques doivent figurer dans l'appareil mathématique sous forme d'invariants unitaires.*

La condition d'invariance unitaire des résultats peut donc être considérée comme un critère supplémentaire de la justesse des postulats fondamentaux et de leurs corollaires. A ce propos rappelons tout d'abord le fait cité au § 17 concernant l'invariance unitaire du caractère hermitien des opérateurs, ainsi que l'invariance unitaire des spectres des valeurs propres des opérateurs hermitiens. Il est facile de se rendre compte que le commutateur $[\hat{H}, \hat{L}]$ est, lui aussi, un invariant unitaire ; cela a pour conséquence que la condition de conservation de toute grandeur physique ne doit pas dépendre de la représentation utilisée. Notons encore que l'invariance unitaire de l'expression $\int \psi_n^* \psi_m \, dx$ exprime maintenant le fait que les fonctions propres d'une grandeur physique sont indépendantes de la condition d'orthonormation. Enfin l'invariance unitaire de l'expression $\int \Phi^*(x)\, \hat{L}(x)\, \Phi(x)\, dx$ signifie que les valeurs moyennes des grandeurs physiques sont indépendantes de la représentation utilisée.

On remarquera que le résultat (19.4) aurait pu être établi de manière univoque en partant de a condition d'invariance unitaire de la quantité $\langle\lambda\rangle$, ainsi

que de la mise en œuvre de la formule (18.18) qui avait été établie pour un cas particulier. En effet il découle de la condition d'invariance unitaire que $\langle\lambda\rangle$ doit s'exprimer par une formule telle que

$$\int \Phi^*(x)\,\hat{L}^n(x)\,\Phi(x)dx,$$

en la comparant à (18.18) on voit que l'on doit poser $n = 1$.

§ 20. Bases de l'appareil de la mécanique quantique dans la représentation en coordonnées

Pour continuer l'étude de l'appareil de la mécanique quantique il est nécessaire de connaître la forme concrète des opérateurs des différentes grandeurs physiques. Pour cela on doit se fixer une certaine représentation; nous choisirons la *représentation en coordonnée.*

On doit noter l'importance toute particulière de l'établissement de la forme des deux principaux « opérateurs physiques », celui de la coordonnée et celui de l'impulsion de la microparticule. Connaissant ces opérateurs, on peut en déduire l'opérateur de l'énergie [cf. (19.1)] et celui du moment [cf. (19.2)].

Les opérateurs des coordonnées et de l'impulsion. Pour raison de simplicité, nous considérerons un mouvement monodimensionnel le long de l'axe x (les résultats qui seront obtenus se laissent aisément étendre au cas tridimensionnel). En tenant compte des remarques que nous avons faites au § 17 au sujet de la forme des opérateurs hermitiens donnés dans leur propre représentation [cf. (17.26)], nous voyons que l'opérateur de la coordonnée donné dans la représentation en coordonnées est la coordonnée elle-même:

$$\hat{x}(x) = x. \tag{20.1}$$

Ce résultat reste valable pour toute fonction des coordonnées:

$$\hat{U}(x) = U(x). \tag{20.2}$$

Cherchons à déterminer maintenant la forme de l'opérateur de l'impulsion. Au préalable nous allons démontrer le *théorème* suivant. Soit un opérateur $\hat{O}$ qui transforme d'une certaine façon la coordonnée. Si lors de cette transformation l'opérateur $\hat{H}$ ne change pas, les opérateurs $\hat{O}$ et $\hat{H}$ sont commutatifs. *Démonstration*: soit $\hat{O}x = x'$; faisons agir l'opérateur $\hat{O}$ sur $\hat{H}(x)\psi(x)$; on obtient $\hat{O}\hat{H}(x)\psi(x) = \hat{H}(x')\psi(x') = \hat{H}(x)\psi(x') = \hat{H}(x)\hat{O}\psi(x)$. C.Q.F.D.

Supposons que l'opérateur $\hat{O}$ est l'opérateur d'une translation infiniment petite le long de l'axe x: $\hat{O}\psi(x) = \psi(x + \Delta x)$. Mettant à profit la petitesse de la translation, nous écrirons

$$\psi(x + \Delta x) = \left[1 + \Delta x \frac{d}{dx}\right]\psi(x).$$

Par suite

$$\hat{O} = 1 + \Delta x \frac{d}{dx}.$$

En nous basant sur la propriété d'homogénéité de l'espace, nous concluons que l'action de l'opérateur $\hat{O}$ doit laisser immuable le hamiltonien de la microparticule. De là en mettant en pratique le théorème que nous venons de démontrer, nous obtenons $[\hat{O}, \hat{H}] = 0$ ou encore $\left[\frac{d}{dx}, \hat{H}\right] = 0$. Or nous avons démontré au § 19 que toute commutation avec le hamiltonien exprime la loi de conservation de la grandeur physique concernée. Par conséquent, d/dx est le symbole d'un opérateur assurant la conservation d'une certaine grandeur physique. On sait que la grandeur dont la conservation résulte de l'homogénéité de l'espace est l'*impulsion* (cf. § 1). Par suite l'opérateur d/dx doit représenter à une constante additive près l'opérateur de l'impulsion de la microparticule

$$\frac{d}{dx} = \gamma \hat{p}_x. \tag{20.3}$$

On détermine la valeur du facteur γ en considérant le cas limite du passage de la mécanique quantique à la mécanique classique; sans entrer dans les détails de ce calcul, nous indiquerons le résultat final : $\gamma = i/\hbar$ (cf. [10]). Nous voyons ainsi que l'opérateur de la composante x de l'impulsion d'une microparticule se présente dans la représentation en x sous la forme suivante :

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}. \tag{20.4}$$

On étend sans peine les résultats (20.1) et (20.4) au cas tridimensionnel

$$\hat{\vec{r}} = \vec{r}, \tag{20.5}$$

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla. \tag{20.6}$$

Fonctions propres de l'impulsion. A l'aide de (20.4) nous pouvons écrire l'équation des fonctions propres des composantes x de l'impulsion :

$$-i\hbar \frac{d}{dx} \psi_{p_x}(x) = p_x \psi_{p_x}(x). \tag{20.7}$$

On voit sans peine que l'équation (20.7) a des solutions pour toute valeur du paramètre p_x. Il en résulte que l'impulsion de la microparticule *n'est pas quantifiée* (le spectre des valeurs propres de l'opérateur de l'impulsion est continu).

L'équation (20.7) implique que les fonctions propres de l'opérateur $\hat{p}_x$ se présentent sous la forme d'*ondes planes*:

$$\psi_{p_x}(x) = A \exp(ip_x x/\hbar). \tag{20.8}$$

Pour déterminer le facteur A on utilise la condition d'orthonormation (17.17):

$$\int \psi^*_{p'_x}(x)\, \psi_{p_x}(x)\, dx = \delta(p_x - p'_x).$$

En y portant (20.8) on obtient

$$A^2 \int \exp[-ix(p'_x - p_x)/\hbar]\, dx = \delta(p_x - p'_x).$$

D'après (15.17) on a

$$\int \exp[ix(p_x - p'_x)/\hbar]\, dx = 2\pi\hbar\delta(p_x - p'_x).$$

Comparant ces deux dernières égalités, on trouve $A^2 = (2\pi\hbar)^{-1}$. Par suite

$$\psi_{p_x}(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \exp(ip_x x/\hbar). \tag{20.9}$$

Dans le cas tridimensionnel on aura

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \exp(i\vec{p}\vec{r}/\hbar). \tag{20.10}$$

On notera que la fonction propre de l'impulsion définie par (20.10) coïncide avec la fonction d'onde d'une microparticule en mouvement libre (15.15) que nous avons déterminée au § 15.

L'équation de Schrödinger. Reprenons l'équation (18.23) des fonctions propres du hamiltonien:

$$\hat{H}\varphi_E(x) = E\varphi_E(x). \tag{20.11}$$

Utilisons la formule (19.1) donnant le hamiltonien d'une microparticule en mouvement dans un champ potentiel extérieur $U(x)$; en tenant compte de (20.2) et (20.4), cela nous conduit à

$$\hat{H}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U(x). \tag{20.12}$$

En substituant (20.12) dans (20.11) on a

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi_E(x) + [U(x) - E]\,\varphi_E(x) = 0. \tag{20.13}$$

C'est l'*équation* monodimensionnelle *de Schrödinger*, sa généralisation au cas tridimensionnel est

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi_E(\vec{r}) + [U(\vec{r}) - E]\,\varphi_E(\vec{r}) = 0. \tag{20.14}$$

Connaissant la fonction $\varphi_E(x)$, on peut écrire l'expression donnant les amplitudes des états stationnaires $\Psi_E(x, t)$, puisque la dépendance avec le temps se présente sous une forme universelle que nous avons établie au § 13. En utilisant (13.4) et en remarquant que

$$\Psi_E(x, t) = \langle E \mid x, t\rangle = \langle x, t \mid E\rangle^* = C_E^*(t), \tag{20.15}$$

on obtient

$$\Psi_E(x, t) = \varphi_E(x) \exp(-iEt/\hbar). \tag{20.16}$$

On se rend aisément compte que les fonctions $\Psi_E(x, t)$ sont des solutions de l'équation (18.22), où $\hat{H}$ est remplacé par le hamiltonien (20.12). Dans notre cas cette équation s'écrit

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi + U(x) \Psi. \tag{20.17}$$

Cette équation est également appelée équation de Schrödinger; pour être précis, l'équation (20.13) est appelée *équation de Schrödinger indépendante du temps* et l'équation (20.17) *équation de Schrödinger dépendante du temps.*

Le grand mérite de Schrödinger est qu'il a eu l'idée d'écrire le hamiltonien d'une microparticule sous la forme (20.12). Dans la suite de nos raisonnements le résultat (20.12) n'est nullement inattendu, puisqu'il apparaît comme une conséquence des résultats (19.1), (20.2) et (20.4). On notera cependant que le résultat (19.1) a été en fait postulé (plus précisément, on a postulé l'existence d'une analogie entre les relations quanto-mécaniques et classiques). Lorsque Schrödinger avança sa fameuse équation, cette analogie ne paraissait nullement évidente. Et c'est justement le résultat (20.12) qui a été utilisé, comme nous le verrons plus loin, pour justifier l'analogie invoquée.

Les opérateurs des projections du moment et du carré du moment. A l'aide de (19.2) et de (20.4) on arrive aisément à établir les expressions des opérateurs des projections du moment

$$\left.\begin{aligned} \hat{M}_x &= -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right), \\ \hat{M}_y &= -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right), \\ \hat{M}_z &= -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right). \end{aligned}\right\} \tag{20.18}$$

L'opérateur du carré du moment est donné par

$$\hat{M}^2 = \hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2. \tag{20.19}$$

Pour la mise en œuvre des opérateurs du moment, il est préférable d'utiliser, au lieu des coordonnées cartésiennes x, y, z, les coor-

données sphériques r, θ, φ. Rappelons les relations bien connues

$$\left.\begin{aligned} x &= r\sin\theta\cos\varphi, \\ y &= r\sin\theta\sin\varphi, \\ z &= r\cos\theta. \end{aligned}\right\} \tag{20.20}$$

A l'aide de ces relations la dérivée $\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi$ se laisse mettre sous la forme suivante

$$\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi = \frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial\varphi} + \frac{\partial\psi}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial\varphi} + \frac{\partial\psi}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial\varphi} =$$

$$= -\frac{\partial\psi}{\partial x} r\sin\theta\sin\varphi + \frac{\partial\psi}{\partial y} r\sin\theta\cos\varphi = \left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi.$$

De là, en tenant compte de (20.18), on obtient

$$\hat{M}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}. \tag{20.21}$$

De façon similaire on trouve la dérivée $\frac{\partial}{\partial\theta}\psi$,

$$\hat{M}_x \pm i\hat{M}_y = \hbar e^{\pm i\varphi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + i\operatorname{cotg}\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right). \tag{20.22}$$

Avec (20.19) on obtient alors

$$\hat{M}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right]. \tag{20.23}$$

Les relations de permutation. Il s'agit de règles de commutation des opérateurs des coordonnées, de l'impulsion et du moment d'une microparticule. En désignant par les indices i, j, k les composantes cartésiennes de ces opérateurs, les règles de commutation s'énoncent comme suit (les procédés d'établissement de ces règles sont donnés plus loin):

$$[\hat{r}_i, \hat{r}_j] = 0, \tag{20.24}$$

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0, \tag{20.25}$$

$$[\hat{p}_i, \hat{r}_j] = -i\hbar\delta_{ij}, \tag{20.26}$$

$$[\hat{p}_i, \hat{f}(\vec{r})] = -i\hbar\frac{\partial}{\partial r_i}\hat{f}(\vec{r}), \tag{20.27}$$

$$[\hat{M}_i, \hat{r}_j] = i\hbar\sum_k e_{ijk}\hat{r}_k, \tag{20.28}$$

$$[\hat{M}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\sum_k e_{ijk}\hat{p}_k, \tag{20.29}$$

$$[\hat{M}_i, \hat{M}_j] = i\hbar\sum_k e_{ijk}\hat{M}_k. \tag{20.30}$$

e_{ijk} représente un tenseur antisymétrique unité du 3ème ordre; $e_{123} = e_{231} = e_{312} = 1$, $e_{132} = e_{321} = e_{213} = -1$, et les 21 autres com-

posantes de ce vecteur sont nulles (deux au moins des indices de ces composantes sont identiques). Il est facile de se rendre compte que les sommes par rapport à k ne comportent jamais plus d'un seul terme.

Dans la représentation en coordonnées $\hat{r}_i = r_i$, et dans ce cas l'égalité (20.24) est évidente; sa signification physique est que les trois coordonnées de la microparticule peuvent être mesurées simultanément (elles appartiennent à un seul et même ensemble complet des grandeurs, comme nous l'avons indiqué au § 3).

Compte tenu de (20.4) nous pouvons écrire:

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_j]\psi = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r_i\,\partial r_j} - \frac{\partial^2}{\partial r_j\,\partial r_i}\right)\psi.$$

Puisque l'expression de la dérivée seconde est indépendante de l'ordre de différentiation, il s'ensuit que $[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$. Ce résultat signifie que les trois composantes de l'impulsion peuvent être mesurées simultanément (elles font partie d'un seul et même ensemble complet des grandeurs).

On établit le résultat (20.26) en procédant comme suit:

$$[\hat{p}_i, \hat{r}_j]\psi = -i\hbar\left\{\frac{\partial}{\partial r_i}(r_j\psi) - r_j\frac{\partial}{\partial r_i}\psi\right\} = -i\hbar\frac{\partial r_j}{\partial r_i}\psi = -i\hbar\delta_{ij}\psi.$$

Cela signifie que les composantes de l'impulsion et de la coordonnée peuvent être déterminées simultanément si elles sont de signe contraire, mais ne peuvent l'être si elles sont de même signe; cette conclusion est en parfait accord avec la relation d'incertitude entre la coordonnée et l'impulsion d'une microparticule, que nous avons considérée au § 3. L'égalité (20.26) sous-entend également que les trois composantes de la coordonnée et les trois composantes de l'impulsion appartiennent à des ensembles complets différents.

La formule (20.27) est la formule (20.26) généralisée. On a en effet

$$[\hat{p}_i, \hat{f}]\psi = -i\hbar\left\{\frac{\partial}{\partial r_i}(f\psi) - f\frac{\partial}{\partial r_i}\psi\right\} = -i\hbar\frac{\partial f}{\partial r_i}\psi.$$

Les formules (20.28)-(20.30) peuvent être tirées de (19.2) à l'aide des formules de permutation précédentes.

Les formules (20.28) et (20.29) signifient que les composantes du moment et de la coordonnée peuvent être mesurées simultanément si elles sont de même signe, et ne peuvent l'être si elles sont de signes contraires. Elles sous-entendent également que les projections du moment ne peuvent appartenir ni à l'ensemble complet de grandeurs dont font partie les coordonnées, ni à celui auquel appartiennent les composantes de l'impulsion.

Enfin la formule (20.30) signifie que les différentes composantes du moment ne possèdent pas un système fermé de fonctions propres et ne peuvent appartenir à un seul et même ensemble complet de

grandeurs. En se remémorant les exemples que nous avons donnés ci-dessus, on arrive à la conclusion que les différentes composantes du moment ne peuvent être mesurées simultanément. Cette conclusion est juste, mais demande à être précisée ; pour cela il est commode de prendre pour exemple les composantes du moment. Il existe un cas particulier où les trois composantes du moment peuvent être mesurées simultanément, c'est le cas où les trois composantes sont nulles. Ce cas n'affecte en rien la généralité du résultat, puisque, comme nous l'avons indiqué au § 17, l'existence d'une seule fonction propre commune à plusieurs opérateurs n'a rien à voir avec la commutativité des opérateurs.

Utilisant (20.19) et (20.30) on établit sans difficulté encore une règle de commutation

$$[\hat{M}^2, \hat{M}_i] = 0. \tag{20.31}$$

La signification en est que dans un ensemble complet on doit inclure le carré du moment et l'une des projections du moment.

On notera que le fait que toutes les composantes de l'impulsion peuvent être simultanément mesurées et que l'on ne peut le faire pour les composantes du moment trouve une interprétation bien évidente. En effet les translations parallèles liées à l'opérateur de l'impulsion sont commutatives, tandis que celles liées à l'opérateur du moment rotatoire ne le sont pas. Il est parfaitement indifférent que l'on commence par un déplacement le long de l'axe x, puis suivant l'axe y, ou que l'on procède dans l'ordre inverse. Par contre, l'ordre dans lequel on effectue les rotations affecte le résultat final. Si on prend, par exemple, un point sur l'axe z et qu'on lui fasse subir deux rotations consécutives de 90°, une première fois dans l'ordre — autour de l'axe x puis autour de l'axe z, et une deuxième fois d'abord autour de l'axe z puis autour de l'axe x, on arrive à des résultats différents quant à la position du point.

L'opérateur de l'inversion ; la parité. On définit l'opérateur de l'inversion $\hat{P}$ par l'égalité suivante :

$$\hat{P}\psi(\vec{r}, t) = P\psi(-\vec{r}, t), \tag{20.32}$$

où P est une constante. Si on fait agir deux fois de suite l'opérateur de l'inversion sur une fonction, on retrouve la fonction initiale $\psi(\vec{r},t)$. Il s'ensuit que $P^2 = 1$, donc

$$P = \pm 1. \tag{20.33}$$

La grandeur P porte le nom de *parité spatiale*. Lorsque $P = 1$, ce qui implique que $\hat{P}\psi(\vec{r}, t) = \psi(-\vec{r}, t)$, on dit que la microparticule possède une parité positive ; lorsque $P = -1$ et $\hat{P}\psi(\vec{r}, t) = -\psi(-\vec{r}, t)$, on dit que la microparticule possède une parité négative.

Supposons que $[\hat{P}, \hat{H}] = 0$. Dans ce cas, d'après (19.10), la parité est une grandeur conservative : si à un instant initial l'état

de la microparticule était par exemple pair, il doit rester pair à tout instant ultérieur (ce qui impose naturellement certaines limitations aux changements que peut subir l'état de la microparticule).

Nous avons indiqué au § 1 que les lois de conservation de l'énergie, de l'impulsion et du moment sont la conséquence de certaines propriétés de symétrie de l'espace et du temps. La loi de conservation de la parité spatiale ne présente donc rien d'exceptionnel. Cette loi est une conséquence de la symétrie par rapport à l'opération d'inversion, qui se laisse ramener à la combinaison d'une opération de rotation et d'une opération de réflexion dans un miroir [il est en effet facile de se rendre compte que l'opération $(x, y, z) \to (-x, -y, -z)$ équivaut à une rotation de 181° autour de l'axe z, par exemple, suivie d'une réflexion dans un plan perpendiculaire à cet axe]. En remarquant que la symétrie par rapport aux rotations implique la conservation du moment, on peut tirer la conclusion suivante: la conservation de la parité spatiale est déterminée par le fait que les processus physiques évoluent de la même façon dans le « monde normal » et dans le monde se trouvant « derrière le miroir » * .

Valeurs propres et fonctions propres des opérateurs $\hat{M}_z$ et $\hat{M}^2$. Ecrivons l'équation des fonctions propres de l'opérateur $\hat{M}_z$ défini par (20.21):

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi = M_z \psi. \tag{20.34}$$

La solution de cette équation se présente sous la forme

$$\psi(\varphi) = A \exp(iM_z\varphi/\hbar). \tag{20.35}$$

La fonction ψ est périodique: $\psi(\varphi + 2\pi) = \psi(\varphi)$. Par suite

$$M_z = \hbar m, \quad m = 0, \quad \pm 1, \quad \pm 2. \tag{20.36}$$

Nous retrouvons là un résultat que le lecteur connaît déjà: la projection du moment est quantifiée et prend des valeurs se distinguant entre elles d'un multiple de la constante de Planck (cf. § 2).

Le facteur A figurant dans (20.35) se laisse déterminer à l'aide de la condition de normation $\int_0^{2\pi} \psi_m^* \psi_m d\varphi = 1$. On voit aussitôt que $A = (2\pi)^{-1/2}$. On a donc

$$\psi_m(\varphi) = (2\pi)^{-1/2} \exp(im\varphi). \tag{20.37}$$

---

* On doit cependant remarquer que dans certains processus impliquant des particules élémentaires, la symétrie entre le « monde normal » et le monde de « derrière le miroir » se trouve rompue. En 1957 les expériences de C. Wu ont mis en évidence la non-conservation de la parité spatiale lors de la désintégration β des noyaux; ce résultat avait été prévu en 1956 par T. Lee et C. Yang.

Considérons maintenant l'opérateur $\hat{M}^2$. En utilisant (20.23), on peut écrire

$$-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}+\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)\right]=M^2\psi. \qquad (20.38)$$

En mathématiques cette équation est connue sous le nom d'*équation des fonctions sphériques*. Elle a des solutions limites à condition que

$$M^2=\hbar^2 l(l+1), \quad l=0,\ 1,\ 2,\ \ldots \qquad (20.39)$$

En supposant que cette condition se trouve remplie, nous présenterons les solutions de l'équation (20.38) sous forme de *fonctions sphériques*

$$\psi_{lm}=\sqrt{\frac{(l-|m|)!\,(2l+1)}{(l+|m|)!\,4\pi}}\,P_l^{|m|}(\cos\theta)\,e^{im\varphi}, \qquad (20.40)$$

avec $m=0,\ \pm1,\ \ldots,\ \pm l$. En tenant compte de (20.31), nous pouvons conclure que les opérateurs $\hat{M}_z$ et $\hat{M}^2$ ont des fonctions propres communes; de ce fait on doit assimiler m au nombre quantique magnétique, correspondant à la projection du moment sur l'axe z; ce nombre peut prendre $(2l+1)$ valeurs différentes (depuis $-l$ jusqu'à l). Les fonctions $P_l^{|m|}(\cos\theta)$ figurant dans (20.40) sont les *fonctions associées de Legendre*. Rappelons que

$$P_l^m(x)=(1-x^2)^{m/2}\frac{d^m}{dx^m}P_l(x), \qquad (20.41)$$

où les $P_l(x)$ sont des *polynômes de Legendre*

$$P_l(x)=\frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{dx^l}[(x^2-1)^l]. \qquad (20.42)$$

Les fonctions sphériques $\psi_{lm}(\theta,\ \varphi)$ sont orthonormées:

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\psi_{lm}^*(\theta,\ \varphi)\,\psi_{l'm'}(\theta,\ \varphi)\sin\theta\,d\theta\,d\varphi=\delta_{ll'}\delta_{mm'}. \qquad (20.43)$$

Si le résultat (20.36) est connu, le résultat (20.39) s'obtient en posant

$$M^2=3\langle M_z^2\rangle=3\hbar^2\langle m^2\rangle.$$

La valeur moyenne $\langle m^2\rangle$ est donnée par

$$\langle m^2\rangle=\sum_{m=-l}^{l}\frac{m^2}{2l+1}=2\sum_{m=0}^{l}\frac{m^2}{2l+1}=\frac{1}{3}l(l+1).$$

On en déduit (20.39).

La parité et le moment. Il apparaît de (20.18) que les opérateurs de l'inversion et de n'importe quelle projection du moment sont

commutatifs; d'autre part, sont commutatifs les opérateurs de l'inversion et du carré du moment:

$$[\hat{P}, \hat{M}_i] = 0, \quad [\hat{P}, \hat{M}^2] = 0. \tag{20.44}$$

Cela signifie que les opérateurs $\hat{P}$ et $\hat{M}_i$ possèdent en commun un système fermé de fonctions propres. On peut en dire autant des opérateurs $\hat{P}$ et $\hat{M}^2$. Il en résulte en particulier qu'un état caractérisé par un nombre quantique orbital l donné doit présenter une parité spatiale bien déterminée. En coordonnées sphériques la transformation d'inversion s'exprime par

$$r \to r, \quad \theta \to \pi - \theta, \quad \varphi \to \varphi + \pi. \tag{20.45}$$

En utilisant (20.40)-(20.42), on constate qu'à la suite d'une telle transformation les fonctions $\psi_{lm}(\theta, \varphi)$ se trouvent multipliées par le facteur $(-1)^l$:

$$\psi_{lm} \to (-1)^l \psi_{lm}. \tag{20.46}$$

On voit que les états caractérisés par un l pair présentent une parité positive et les états de l impair présentent une parité négative.

Il est opportun de rappeler ici l'exemple donné au § 3 de l'ensemble complet de grandeurs, incluant M^2, M_z et P [cf. (3.7b)], utilisé pour décrire l'état d'un photon. On notera que la parité et le moment font partie d'un seul et même ensemble de grandeurs. Tout formellement cela découle des relations (20.44). Cependant on peut fournir des arguments ayant une signification concrète. En effet l'« affinité » évidente existant entre la parité et le moment tient à ce que l'opération d'inversion comporte, en plus d'une réflexion dans le miroir, une rotation. Il importe peu dans quel ordre s'effectuent ces opérations: rotation puis réflexion, ou réflexion suivie d'une rotation.

Forme opératorielle des relations de la mécanique classique. Dans ce qui précède nous avons maintes fois mis à profit le fait que l'appareil de la mécanique quantique se base sur les équations de la mécanique classique, exprimées en termes d'opérateurs. Ce fait présente une telle importance qu'il est tout indiqué de revenir sur cette question.

Nous avons déjà signalé l'intuition géniale de Schrödinger qui a avancé la forme (20.12) pour le hamiltonien d'une microparticule. En utilisant cette hypothèse ainsi que le résultat fondamental (19.10), on constate que les équations de la mécanique classique se laissent transposer en mécanique quantique à condition de remplacer les grandeurs physiques par des opérateurs hermitiens. Portons dans (19.10) l'opérateur $\hat{L} = x$ et donnons à l'opérateur $\hat{H}$ la forme (20.12). On obtient alors

$$\hat{\dot{x}} = \hat{p}_x/m. \tag{20.47}$$

C'est un résultat classique bien connu : la vitesse est égale au quotient de l'impulsion par la masse. Selon l'interprétation quantomécanique ce résultat signifie que l'opérateur de vitesse est égal à l'opérateur d'impulsion divisé par la masse. Portons maintenant dans (19.10) l'opérateur $\hat{L} = \hat{p}_x$. En définissant l'opérateur $\hat{H}$ par la formule (20.12), on obtient

$$\dot{\hat{p}}_x = -\frac{d}{dx} U(x). \tag{20.48}$$

On voit que ce n'est rien d'autre que la deuxième loi de Newton écrite sous forme opératorielle.

Nous attirons l'attention du lecteur sur le fait que les opérateurs tels que $\hat{x}$ ou $\dot{\hat{p}}_x$ sont introduits conformément à la définition (19.9). Il s'ensuit que les résultats (20.47) et (20.48) confirment la validité des corrélations classiques pour les valeurs moyennes des grandeurs physiques

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \langle s \mid \hat{p}_x \mid s\rangle/m, \tag{20.47a}$$

$$\frac{d}{dt}\langle p_x\rangle = -\frac{d}{dx} U(x). \tag{20.48a}$$

Cette circonstance ayant été notée par Ehrenfest, on désigne les relations (20.47a) et (20.48a) sous le nom de *théorèmes d'Ehrenfest*. En bref, les théorèmes d'Ehrenfest affirment que les corrélations classiques entre grandeurs physiques se retrouvent en mécanique quantique dans les corrélations entre les valeurs moyennes des grandeurs physiques.

Nous avons fait remarquer au § 19 que l'analogie mathématique entre la mécanique classique et la mécanique quantique doit être utilisée avec discernement, puisque les opérateurs ne commutent pas toujours entre eux. On peut en conclure que l'information que renferment les équations classiques ne peut suffire à bâtir l'appareil de la mécanique quantique. On doit disposer pour cela d'informations supplémentaires concernant les propriétés de commutation des opérateurs en cause. Autrement dit, *les corrélations classiques doivent être complétées par des corrélations de commutation* [telles que (20.26)-(20.30)].

Nous voyons ainsi que c'est précisément les corrélations de commutation qui renferment les informations spécifiques indispensables à l'élaboration de l'appareil de la mécanique quantique. Notons à ce propos que dans le deuxième membre des corrélations de commutation figure toujours la constante de Planck, qui est une constante spécifiquement quantique.

§ 21. La mise en œuvre de l'équation de Schrödinger

Quelques problèmes typiques de la mécanique quantique. Nous allons considérer trois types de problèmes impliquant la résolution de l'équation de Schrödinger.

Premier type de problèmes. On considère le mouvement d'une microparticule dans une région restreinte de l'espace, notamment dans un puits de potentiel (par exemple, mouvement d'un électron au sein de l'atome); un tel mouvement est dit *fini*, et la microparticule qui l'effectue est dans un état *lié*. On utilise l'équation de Schrödinger ne dépendant pas du temps [cf. (20.13) ou (20.14)]. En résolvant l'équation de Schrödinger avec des conditions aux limites imposées à la fonction d'onde et à sa première dérivée *, on détermine le spectre des valeurs de l'énergie de la microparticule ainsi que les fonctions d'onde des états stationnaires.

Deuxième type de problèmes. On considère un mouvement *infini* (spatialement illimité) dans un champ extérieur. Par exemple, la microparticule traverse une barrière de potentiel (rappelons à ce propos l'effet tunnel cité au § 4) ou est soumise à diffusion par un centre de force. Comme le mouvement est illimité, le spectre énergétique de la microparticule est continu. En résolvant l'équation de Schrödinger indépendante du temps, on détermine la forme des fonctions d'onde de la microparticule à grande distance du centre de diffusion (ou d'une barrière de potentiel) puis, disposant de ce résultat, on calcule, par exemple, la probabilité de diffusion dans un angle donné (ou la probabilité de passage à travers la barrière ou de réflexion sur la barrière).

Troisième type de problèmes. Dans les deux premiers types de problèmes il s'agissait d'états stationnaires de la microparticule, aussi utilisait-on l'équation de Schrödinger ne dépendant pas du temps. Le troisième type de problèmes concerne *la variation dans le temps de l'état d'une microparticule*, ce qui exige la mise en œuvre de l'équation de Schrödinger dépendant du temps [cf. (20.17)]. La résolution de cette équation permet de calculer la probabilité de telle ou telle autre transition quantique se produisant sous des actions extérieures.

Nous donnons dans ce paragraphe ainsi qu'au § 24 des exemples de problèmes des deux premiers types, quant aux problèmes du troisième type, le lecteur les trouvera au § 25. Nous ne donnons ici que quelques problèmes caractéristiques, les questions d'application de la mécanique quantique étant largement traitées dans la littérature (citons notamment les recueils de problèmes de mécanique quantique [34, 35]).

---

* La question de la fixation des conditions aux limites est considérée dans ce qui suit à l'occasion d'exemples concrets.

Etude du comportement d'une particule placée dans un puits de potentiel unidimensionnel de forme rectangulaire, à « parois » de hauteur infinie. Un tel puits de potentiel est décrit par un potentiel U tel que

$$U(x)=\begin{cases}\infty, & x<0,\\ 0, & 0\leqslant x\leqslant a,\\ \infty, & x>a.\end{cases} \tag{21.1}$$

Le paramètre a représente la largeur du puits;l'énergie est évaluée à partir du fond du puits. A l'intérieur du puits ($0 \leqslant x \leqslant a$) l'équation de Schrödinger (20.13) est de la forme

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2}+k^2\varphi=0, \tag{21.2}$$

avec

$$k^2 = 2mE/\hbar^2. \tag{21.3}$$

Aux frontières du puits (en $x = 0$ et $x = a$) la fonction d'onde φ qui est partout continue s'annule, puisque la hauteur infinie des « parois » exclut toute probabilité de présence de la particule en dehors du puits de potentiel *. Les conditions aux limites sont donc

$$\varphi(0) = \varphi(a) = 0. \tag{21.4}$$

Ecrivons la solution générale de l'équation différentielle (21.2):

$$\varphi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx). \tag{21.5}$$

Comme $\varphi(0) = 0$, il s'ensuit que $B = 0$. On a donc

$$\varphi(x) = A \sin(kx). \tag{21.6}$$

De la condition $\varphi(a) = 0$ on déduit que

$$ka = \pi n, \quad n \text{ étant un nombre entier.} \tag{21.7}$$

A l'aide de (21.3) nous pouvons écrire ce dernier résultat sous la forme suivante

$$E_n = n^2\pi^2\hbar^2/2ma^2. \tag{21.8}$$

L'équation (21.8) détermine le spectre des valeurs de l'énergie (des niveaux d'énergie) de la particule se trouvant dans le puits de potentiel. Cette équation est la même que l'équation (5.2) que nous connaissons déjà.

D'après (21.5) et (21.7) la fonction d'onde $\varphi_n(x)$ correspondant au n-ième niveau d'énergie est de la forme $\varphi_n(x) = A \sin(\pi nx/a)$.

* Nous verrons plus loin que si les « parois » sont de hauteur finie, la possibilité de trouver la particule hors du puits n'est nullement exclue.

On détermine la constante d'intégration A à partir de la condition de normation $\int_0^a \varphi_n^2(x)\,dx=1$ [revoir à ce sujet (15.13)]. Il est facile de se rendre compte que $A = \sqrt{2/a}$ et par suite

$$\varphi_n(x) = \sqrt{2/a}\,\sin(\pi n x/a). \tag{21.9}$$

Nous avons ainsi réussi à déterminer les niveaux d'énergie et les fonctions d'onde orthonormées des états stationnaires d'une microparticule se trouvant dans un puits de potentiel rectangulaire unidimensionnel infiniment profond.

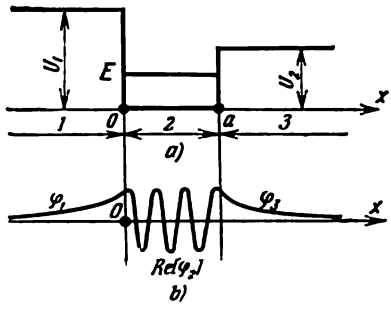


Fig. 21.1.

Cas d'un puits de potentiel rectangulaire de profondeur finie. Considérons le puits de potentiel de forme rectangulaire représenté fig. 21.1, *a*. Puisque la particule se trouve dans le puits, $E < U_1$ et $E < U_2$. Le potentiel étant rectangulaire, on peut délimiter trois régions spatiales: la région *1* ($x < 0$), la région *2* ($0 \leqslant x \leqslant a$) et la région *3* ($x > a$). Nous étudierons ces trois régions une par une, puis nous raccorderons aux frontières les résultats obtenus (donc aux points $x = 0$ et $x = a$). L'équation de Schrödinger (20.13) s'écrit: pour la région *1*

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} - \varkappa_1^2\varphi = 0, \quad \text{où} \quad \varkappa_1^2 = 2m(U_1 - E)/\hbar^2, \tag{21.10a}$$

pour la région *2*

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + k^2\varphi = 0, \quad \text{où} \quad k^2 = 2mE/\hbar^2, \tag{21.10b}$$

pour la région *3*

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} - \varkappa_2^2\varphi = 0, \quad \text{où} \quad \varkappa_2^2 = 2m(U_2 - E)/\hbar^2. \tag{21.10c}$$

Les solutions générales de ces trois équations différentielles s'écrivent:
pour la région *1*

$$\varphi_1 = A_1 \exp(\varkappa_1 x) + B_1 \exp(-\varkappa_1 x), \tag{21.11a}$$

pour la région *2*

$$\varphi_2 = A_2 \exp(ikx) + B_2 \exp(-ikx), \tag{21.11b}$$

pour la région *3*

$$\varphi_3 = A_3 \exp(\varkappa_2 x) + B_3 \exp(-\varkappa_2 x) \qquad (21.11c)$$

[on notera que la solution de l'équation (21.10b) peut s'écrire soit sous la forme (21.11b) soit sous la forme (21.5)]. Comme la fonction d'onde est limitée, on doit poser $B_1 = 0$ et $A_3 = 0$, ce qui donne

$$\begin{aligned} \varphi_1(x) &= A_1 \exp(\varkappa_1 x), \\ \varphi_2(x) &= A_2 \exp(ikx) + B_2 \exp(-ikx), \\ \varphi_3(x) &= B_3 \exp(-\varkappa_2 x). \end{aligned} \qquad (21.12)$$

L'allure générale des fonctions φ_1, φ_3 et Re $[\varphi_2]$ est représentée fig. (21.1, *b*). On attirera l'attention du lecteur sur le fait que dans le cas d'un puits de potentiel de profondeur finie il existe toujours une probabilité de trouver la particule hors du puits; cette probabilité décroît suivant une loi exponentielle à mesure que l'on s'éloigne du puits de potentiel.

Pour déterminer les quatre coefficients (A_1, A_2, B_2, B_3), on mettra à profit le fait qu'aux frontières entre nos trois régions aussi bien la fonction d'onde que sa première dérivée doivent être continues. Or il est évident que la fonction d'onde est continue. Il est facile de démontrer que sa dérivée l'est également. Pour ce faire, intégrons l'équation de Schrödinger (20.13) à l'intérieur d'une région $(a - \Delta, a + \Delta)$ incluant les sauts de potentiel. Nous obtenons

$$\frac{d\varphi}{dx}(a+\Delta) - \frac{d\varphi}{dx}(a-\Delta) = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{a-\Delta}^{a+\Delta} [U(x) - E]\, \varphi\, dx.$$

Comme sous le signe intégral figurent des fonctions limitées, à la limite $\Delta \to 0$ cette intégrale tend vers zéro. En définitive on trouve $\frac{d\varphi}{dx}(a+0) = \frac{d\varphi}{dx}(a-0)$, c.q.f.d.

Revenons à notre problème et écrivons les conditions aux limites (ce qui nous permettra de raccorder aux frontières les solutions obtenues pour les différentes régions):

$$\left.\begin{aligned} \varphi_1(0) &= \varphi_2(0), \\ \varphi_2(a) &= \varphi_3(a), \\ \frac{d\varphi_1}{dx}(0) &= \frac{d\varphi_2}{dx}(0), \\ \frac{d\varphi_2}{dx}(a) &= \frac{d\varphi_3}{dx}(a). \end{aligned}\right\} \qquad (21.13)$$

En substituant dans (21.13) les expressions (21.12), nous obtenons un système d'équations définissant les coefficients A_1, A_2, B_2, B_3:

$$\left.\begin{aligned}
&A_1 = A_2 + B_2,\\
&A_2 \exp(ika) + B_2 \exp(-ika) = B_3 \exp(-\varkappa_2 a),\\
&\varkappa_1 A_1 = ik(A_2 - B_2),\\
&ikA_2 \exp(ika) - ikB_2 \exp(-ika) =\\
&\qquad\qquad = -\varkappa_2 B_3 \exp(-\varkappa_2 a).
\end{aligned}\right\} \qquad (21.14)$$

Le système (21.14) est un système homogène d'équations linéaires. On sait que pour qu'un tel système ait des solutions différentes de zéro, il faut que son déterminant soit nul. En égalant le déterminant à zéro, nous obtenons une équation pour la détermination de l'énergie E (rappelons que les quantités k, $\varkappa_1$, $\varkappa_2$ s'expriment en fonction de l'énergie E). Les racines de cette équation représenteront les différentes valeurs possibles de l'énergie de la particule.

Remarquons que du point de vue des mathématiques la quantification de l'énergie résulte directement de l'homogénéité du système (21.14). La résolution de tous les problèmes concernant la détermination des valeurs propres des grandeurs physiques se ramène à ceci: la particule est pour ainsi dire abandonnée à elle-même, en ce sens qu'elle est soustraite à toute action extérieure; de ce fait les équations correspondantes ne renferment aucune inhomogénéité; par suite la particule s'impose son « propre régime », caractérisé par des paramètres qui lui sont propres (fréquence, énergie, etc.). L'exemple le plus simple, emprunté à la physique classique, est le pendule. Si le pendule est en mouvement libre, il oscillera avec une fréquence propre indépendante du procédé d'excitation des oscillations.

Ainsi pour déterminer les valeurs de l'énergie de la particule, on doit égaler à zéro le déterminant du système (21.14) et résoudre l'équation que l'on obtient alors. Cependant il n'est pas bien commode d'avoir affaire à un déterminant du quatrième ordre; aussi commencerons-nous par simplifier notre système d'équations et pour cela nous poserons $\varphi_2 = C \sin(kx + b)$ (cette forme d'écriture est équivalente à celle donnée ci-dessus; nous laisserons au lecteur le soin d'exprimer les nouveaux coefficients C et b en fonction des coefficients A_2 et B_2). Le système (21.14) s'écrira maintenant

$$\left.\begin{aligned}
&A_1 = C \sin b,\\
&C \sin(ka + b) = B_3 \exp(-\varkappa_2 a),\\
&\varkappa_1 A_1 = kC \cos b,\\
&kC \cos(ka + b) = -\varkappa_2 B_3 \exp(-\varkappa_2 a).
\end{aligned}\right\} \qquad (21.15)$$

En divisant la troisième équation de ce système par la première et la quatrième par la deuxième, nous obtenons

$$\left.\begin{aligned} \varkappa_1 &= k \operatorname{cotg} b, \\ \varkappa_2 &= -k \operatorname{cotg}(ka+b). \end{aligned}\right\} \qquad (21.16)$$

Au lieu d'avoir un système de quatre équations nous avons maintenant un système de deux équations. De la première équation (21.16) nous tirons $\operatorname{cotg} b = \varkappa_1/k$.

Il en résulte

$$\sin b = (1+\operatorname{cotg}^2 b)^{-1/2} = \frac{kh}{\sqrt{2mU_1}}.$$

De même on déduit de la deuxième équation (21.16)

$$\sin(ka+b) = -\frac{kh}{\sqrt{2mU_2}}.$$

En définitive nous arrivons à une équation non explicite servant à déterminer k (et donc les niveaux d'énergie):

$$ka = n\pi - \arcsin\frac{kh}{\sqrt{2mU_1}} - \arcsin\frac{kh}{\sqrt{2mU_2}}, \qquad (21.17)$$

où n sont des nombres entiers. La figure (21.2) représente en fonction de k les premier et second membres de l'équation (21.17). Dans la situation qu'illustre la fig. 21.2 la particule possède trois niveaux d'énergie auxquels correspondent trois valeurs de k: k_1, k_2, k_3. Si on fait varier la largeur du puits de potentiel, on fait varier la pente de la droite $y = ka$, ce qui entraîne une variation des positions et du nombre des niveaux d'énergie. Si on diminue la largeur du puits de potentiel, cette même droite s'abaisse et les niveaux d'énergie commenceront à « sortir » du puits, et leur nombre ira en diminuant. Si on augmente la largeur du puits, la droite $y = ka$ se redressera et interceptera un nombre de plus en plus grand de branches définies par les arcs sinus; le nombre de niveaux d'énergie existant dans le puits de potentiel ira donc en augmentant. Lorsque $a \to \infty$, le nombre de niveaux d'énergie croît indéfiniment et nous aboutissons finalement à un spectre d'énergie continu. Il est tout aussi facile de voir ce qui se produit si on modifie la profondeur du puits. Plus grande sera la profondeur, plus grand sera le nombre de niveaux d'énergie dans le puits de potentiel.

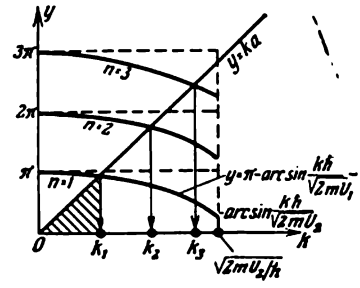


Fig. 21.2.

Les calculs ultérieurs comportent: la détermination à l'aide de (21.17) de toutes les valeurs possibles de k et des valeurs correspondantes de E, $\varkappa_1$, $\varkappa_2$; une fois connues, on porte ces valeurs dans (21.15) et on résout le système d'équations par rapport aux coefficients; on portera alors ces résultats dans les équations des fonctions d'onde (21.12). Nous nous abstiendrons de développer ces calculs en raison des difficultés mathématiques qu'ils impliquent.

Remarquons pour conclure que nous pouvons utiliser le résultat (21.17), par exemple, pour évaluer la valeur minimum E_1 de l'énergie d'une particule se trouvant dans un puits de potentiel. Pour ce faire, on utilise le triangle hachuré de la fig. 21.2 et on pose $k_1 a \approx \pi$. On en déduit $E_1 \approx \pi^2\hbar^2/2ma^2$. Ce résultat est en bon accord avec l'estimation (4.11) que nous avons obtenue au § 4 à l'aide de la relation d'incertitude (3.3).

Particule soumise à l'action d'un champ de symétrie sphérique. Pour procéder à l'étude du comportement d'une microparticule dans un champ de symétrie sphérique, il est commode d'utiliser les coordonnées sphériques r, θ, φ. Dire que le champ présente une symétrie sphérique signifie que $U(\vec{r}) = U(r)$. Dans un système de coordonnées sphériques l'opérateur Δ se présente sous la forme suivante

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\Delta_{\theta\varphi}, \tag{21.18}$$

avec

$$\Delta_{\theta\varphi} = \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right). \tag{21.19}$$

Compte tenu de ces relations, l'équation de Schrödinger (20.14) s'écrit

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\psi\right) + \frac{1}{r^2}\Delta_{\theta\varphi}\psi(r, \theta, \varphi) + \\ + (2m/\hbar^2)[E - U(r)]\psi(r, \theta, \varphi) = 0. \tag{21.20}$$

En coordonnées sphériques on peut effectuer dans cette dernière équation une séparation des variables, ce qui implique que sa solution peut être recherchée sous la forme d'un produit de deux fonctions: une fonction ne dépendant que de r et une deuxième fonction ne dépendant que des variables angulaires θ et φ:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\,\Phi(\theta, \varphi). \tag{21.21}$$

En portant (21.21) dans (21.20) on arrive à un résultat tel que

$$\frac{\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + r^2\frac{2m}{\hbar^2}[E - U(r)]R(r)}{R(r)} = -\frac{\Delta_{\theta\varphi}\Phi}{\Phi(\theta, \varphi)}. \tag{21.22}$$

Comme les premier et second membres de l'égalité (21.22) dépendent des variables différentes (l'un de r et l'autre de θ, φ) chacun de ces membres doit être égal à une certaine constante λ. En introduisant cette constante, on peut écrire:

$$-\Delta_{\theta\varphi}\Phi(\theta, \varphi) = \lambda\Phi(\theta, \varphi). \tag{21.23}$$

En comparant (21.19) à (20.23) on constate qu'en fait (21.23) représente l'équation des valeurs propres et des fonctions propres de l'opérateur $\hat{M}^2$. On peut donc faire usage des formules (20.39) et (20.40), ce qui nous conduit au résultat suivant

$$\lambda = l(l+1), \quad l = 0, 1, 2, \ldots, \tag{21.24}$$

$$\Phi(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\cdot\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}\, P_l^{|m|}(\cos\theta)\, e^{im\varphi} \equiv Y_{lm}(\theta, \varphi), \tag{21.25}$$

où $m = 0, \pm 1, \ldots, \pm l$. Les fonctions $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ sont les fonctions sphériques (que nous avons introduites au § 20). Il est opportun de donner ici les formules de quelques premières fonctions sphériques

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \tag{21.26a}$$

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta; \quad Y_{1,\pm1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\varphi}, \tag{21.26b}$$

$$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{4\pi}}\left(\frac{2}{3}\cos^2\theta - \frac{1}{2}\right);$$

$$Y_{2,\pm1} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{\pm i\varphi};$$

$$Y_{2,\pm2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta e^{\pm 2i\varphi}. \tag{21.26c}$$

On notera que le « terme angulaire » de la fonction d'onde ne dépend pas de la forme concrète du potentiel $U(r)$; c'est une conséquence directe et fort importante de la symétrie sphérique du potentiel.

Considérons le « terme radial » de la fonction d'onde, c'est-à-dire la fonction $R(r)$. D'après (21.22) et (21.24) cette fonction doit être solution de l'équation

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \frac{2m}{\hbar^2}[E - U_l(r)]R(r) = 0, \tag{21.27}$$

où on a utilisé la notation

$$U_l(r) = U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}. \tag{21.28}$$

Il est remarquable que l'équation (21.27) peut être ramenée à l'équation unidimensionnelle de Schrödinger en utilisant une condition aux limites particulières pour $r = 0$. Pour ce faire, on utilise la substitution

$$\varphi(r) = rR(r) \tag{21.29}$$

et on exige en raison du caractère limité de la fonction $R(r)$ que soit remplie la condition $\varphi(0) = 0$. Il est facile de se rendre compte que la substitution (21.29) ramène l'équation (21.27) à l'équation unidimensionnelle de Schrödinger:

$$\frac{d^2\varphi}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - U_l(r)]\varphi(r) = 0, \tag{21.30}$$

la condition aux limites $\varphi(0) = 0$ correspond au cas d'un puits de potentiel unidimensionnel ayant à gauche une paroi verticale infiniment haute en $r = 0$.

Une étude plus poussée de l'équation (21.30) exige que soit donnée la forme concrète du potentiel $U(r)$.

On notera qu'au groupe des problèmes relatifs au mouvement d'une particule dans un champ à symétrie sphérique appartiennent notamment les problèmes du mouvement de l'électron dans l'atome ainsi que les problèmes de la diffusion des particules par des centres de diffusion à symétrie sphérique.

L'équation de continuité et l'équation de Schrödinger. Nous nous proposons d'établir une analogie formelle entre l'équation de Schrödinger (dépendante du temps) et l'équation de continuité qui est largement utilisée en physique classique, notamment en hydrodynamique. Soit un certain milieu (un milieu liquide, par exemple) caractérisé par les fonctions $\rho(\vec{r})$ et $\vec{v}(\vec{r})$ [$\rho(\vec{r})$ étant la densité du milieu et $\vec{v}(\vec{r})$ la vitesse des particules du milieu en un point $\vec{r}$; il est évident que ces fonctions peuvent dépendre du temps]. Considérons un volume V du milieu; la variation par unité de temps de la quantité de liquide se trouvant dans ce volume est égale à $\frac{\partial}{\partial t}\int_V \rho\, dV$. Prenons sur la surface S délimitant ce volume un élément de surface dS et associons-lui un vecteur $\vec{dS}$ de module dS et dirigé suivant la normale extérieure à l'élément de surface. La quantité de liquide s'écoulant par unité de temps du volume V à travers l'élément de surface $\vec{dS}$ est égale à $\rho\vec{v}\vec{dS}$, et à travers la surface S s'écoule une quantité de liquide égale à $\oint_S \rho\vec{v}\vec{dS}$. La condition de conservation de la matière exige que soit satisfaite

l'égalité entre les quantités $-\frac{\partial}{\partial t}\int\limits_V \rho\, dV$ et $\oint\limits_S \rho\vec{v}\,d\vec{S}$. On écrira donc

$$\frac{\partial}{\partial t}\int\limits_V \rho\, dV + \oint\limits_S \rho\vec{v}\,d\vec{S} = 0.$$

En remplaçant l'intégrale le long d'une surface fermée par une intégrale de volume, l'égalité précédente devient

$$\int\limits_V \left(\frac{\partial\rho}{\partial t} + \operatorname{div}\vec{j}\right) dV = 0, \qquad (21.31)$$

où $\vec{j} = \rho\vec{v}$ est le vecteur densité de flux du liquide.

L'équation (21.31) ne dépend pas du choix du volume V, aussi nous pouvons réduire indéfiniment le volume V jusqu'à ce qu'il devienne ponctuel. A la limite $V \to 0$, l'équation (21.31) se transforme en une équation différentielle pour ce point

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \operatorname{div}\vec{j} = 0. \qquad (21.32)$$

C'est l'*équation de continuité* classique.

Considérons maintenant l'équation de Schrödinger dépendant du temps. Généralisons l'équation (20.17) au cas tridimensionnel:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{r}, t) + U(\vec{r})\Psi(\vec{r}, t). \qquad (21.33)$$

Introduisons tout formellement un certain « milieu » dont la densité serait définie par $\Psi\Psi^*$. On pourrait appeler cette densité « densité de probabilité », en entendant par là que la probabilité de présence d'une particule sera plus grande là où la densité du « milieu » est la plus grande.

A cette « densité de probabilité » on peut attribuer une signification assez simple, en imaginant que l'espace est peuplé d'un grand nombre de particules (on doit négliger toute interaction entre ces particules). Il est évident que le nombre de particules renfermées dans un élément de volume ΔV doit être proportionnel à la probabilité de présence d'une particule dans cet élément de volume. Dans cette approche la densité de probabilité $\Psi\Psi^*$ peut être assimilée à la densité du nombre de particules.

En procédant comme dans le cas classique, nous commencerons par considérer un certain volume V:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int\limits_V \rho\, dV = \frac{\partial}{\partial t}\int\limits_V \Psi\Psi^*\, dV = \int\limits_V \left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t} + \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\right) dV.$$

En y portant $\frac{\partial}{\partial t}\Psi$ et $\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*$ de l'équation de Schrödinger (21.33)

et de l'équation conjuguée à (21.33), on obtient

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V \Psi\Psi^* \, dV = \frac{i\hbar}{2m}\int_V (\Psi^*\Delta\Psi - \Psi\Delta\Psi^*)\, dV =$$

$$= \frac{i\hbar}{2m}\int_V \operatorname{div}(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*)\, dV.$$

Récrivons cette dernière équation sous la forme

$$\int_V \left[\frac{\partial}{\partial t}(\Psi\Psi^*) - \operatorname{div}\left\{\frac{i\hbar}{2m}(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*)\right\}\right] dV = 0, \quad (21.34)$$

qui, après réduction du volume V à un point, devient

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Psi\Psi^*) - \operatorname{div}\left[\frac{i\hbar}{2m}(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*)\right] = 0. \quad (21.35)$$

En établissant une analogie entre (21.34) et (21.31) [ou entre (21.35) et (21.32)], on voit que l'équation de Schrödinger représente une certaine équation de continuité quanto-mécanique, à condition d'introduire à côté du vecteur *densité de probabilité* *

$$\rho = \Psi^* \Psi = \varphi^* \varphi \quad (21.36)$$

le *vecteur de densité de flux de probabilité*

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m}(\Psi\nabla\Psi^* - \Psi^*\nabla\Psi) = \frac{i\hbar}{2m}(\varphi\nabla\varphi^* - \varphi^*\nabla\varphi). \quad (21.37)$$

En assimilant (21.36) à une densité du nombre de particules, le vecteur (21.37) peut être considéré comme le vecteur de densité de flux des particules. En adoptant cette interprétation des vecteurs, l'équation de continuité quanto-mécanique (21.35) exprime la condition de conservation du nombre de particules.

Dans le cas d'un mouvement unidimensionnel le long de l'axe x l'équation (21.37) s'écrit

$$j = \frac{i\hbar}{2m}\left(\varphi\frac{d\varphi^*}{dx} - \varphi^*\frac{d\varphi}{dx}\right). \quad (21.38)$$

Remarquons, pour conclure, que l'on ne doit assurément pas attribuer au vecteur quanto-mécanique $\vec{j}$ la signification d'un flux proprement dit, puisque pour définir un flux réel on doit pouvoir déterminer en des points donnés de la surface les valeurs de la vitesse (ou de l'impulsion), ce qui est en contradiction avec la relation d'incertitude.

---

* Les fonctions $\Psi(\vec{r}\ t)$ et $\varphi(\vec{r})$ sont liées entre elles par une corrélation du type (20.16).

Passage d'une particule au-dessus ou au travers d'une barrière de potentiel. Soit une barrière de potentiel unidimensionnelle de forme rectangulaire (fig. 21.3); supposons que, venant de la gauche, se dirigent vers elle des particules ayant une énergie E inférieure à la hauteur U de la barrière de potentiel. Délimitons trois régions spatiales et écrivons les équations de Schrödinger (20.13) adaptées à ces trois régions:

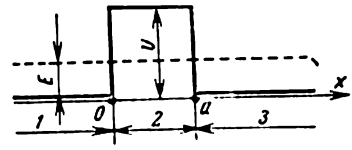


Fig. 21.3.

$$\varphi_1(x) = A_1 \exp(ikx) + B_1 \exp(-ikx); \quad k = \sqrt{2mE}/\hbar,$$
$$\varphi_2(x) = A_2 \exp(\varkappa x) + B_2 \exp(-\varkappa x); \quad \varkappa = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}. \tag{21.39}$$
$$\varphi_3(x) = A_3 \exp(ikx) + B_3 \exp(-ikx).$$

Les termes en $\exp(ikx)$ décrivent des particules qui se déplacent dans le sens positif de l'axe x, et les termes en $\exp(-ikx)$ des particules se déplaçant en sens inverse. Comme les particules se propagent dans le sens positif, on doit exclure dans la troisième équation φ_3 le deuxième terme du second membre en posant $B_3 = 0$. Tous les autres coefficients sont différents de zéro. Le terme ayant A_1 pour coefficient décrit les particules tombant sur la barrière, le terme avec le coefficient B_1 décrit les particules réfléchies par la barrière et le terme avec le coefficient A_3 décrit les particules qui ont traversé la barrière.

Les conditions de continuité de la fonction d'onde et de sa première dérivée aux points $x = 0$ et $x = a$ impliquent l'apparition du système des quatre équations suivantes

$$\left.\begin{aligned} &A_1 + B_1 = A_2 + B_2, \\ &A_2 \exp(\varkappa a) + B_2 \exp(-\varkappa a) = A_3 \exp(ika), \\ &ik(A_1 - B_1) = \varkappa(A_2 - B_2), \\ &\varkappa[A_2 \exp(\varkappa a) - B_2 \exp(-\varkappa a)] = ikA_3 \exp(ika). \end{aligned}\right\} \tag{21.40}$$

On constate que l'on ne dispose que de quatre équations pour calculer cinq coefficients. Cependant il y a en fait non pas cinq mais quatre inconnues. On doit en effet définir une densité de flux des particules incidentes (j_{inc}). Cette densité de flux est donnée par la formule (21.38), où on doit substituer $\varphi = A_1 \exp(ikx)$. On a donc

$$j_{\text{inc}} = |A_1|^2 hk/m. \tag{21.41}$$

En se fixant la valeur de j_{inc}, on se fixe la valeur du coefficient A_1.

On trouve de même pour la densité de flux des particules réfléchies

$$j_{\text{réf}} = |B_1|^2 \hbar k/m, \tag{21.42}$$

et pour la densité de flux des particules ayant traversé la barrière on trouve

$$j_{\text{tr}} = |A_3|^2 \hbar k/m. \tag{21.43}$$

En règle générale, dans les problèmes du type considéré on choisit j_{inc} tel que $A_1 = 1$. Dans ce cas le système (21.40) se présente sous la forme suivante

$$\left.\begin{aligned} &1 + B_1 = A_2 + B_2, \\ &A_2 \exp(\varkappa a) + B_2 \exp(-\varkappa a) = A_3 \exp(ika), \\ &k(1 - B_1) = \varkappa (A_2 - B_2), \\ &\varkappa [A_2 \exp(\varkappa a) - B_2 \exp(-\varkappa a)] = ikA_3 \exp(ika). \end{aligned}\right\} \tag{21.44}$$

Le système (21.44) est un système non homogène de quatre équations linéaires comportant quatre coefficients inconnus. Un système non homogène peut avoir des solutions quelles que soient les valeurs de k et $\varkappa$, donc quelle que soit la valeur de l'énergie E de la particule. Cette conclusion est conforme au fait que dans le cas d'un mouvement indéfini de la particule son énergie n'est pas quantifiée.

Calculons la part de particules ayant traversé la barrière:

$$D = \frac{j_{\text{tr}}}{j_{\text{inc}}}. \tag{21.45}$$

La quantité D est désignée sous le nom de *coefficient de traversée* de la barrière. En résolvant le système d'équations (21.44) (nous omettons les calculs), on obtient

$$A_3 = -\frac{4ik}{\varkappa} e^{-ika} \left[e^{\varkappa a} \left(1 - \frac{ik}{\varkappa}\right)^2 - e^{-\varkappa a} \left(1 + \frac{ik}{\varkappa}\right)^2 \right]^{-1}. \tag{21.46}$$

A l'aide de (21.43) et (21.45) on trouve alors

$$D = \frac{4k^2\varkappa^2}{4k^2\varkappa^2 + (k^2 + \varkappa^2)^2 \operatorname{sh}^2(\varkappa a)} \tag{21.47}$$

Dans le cas particulier où $\varkappa a \gg 1$ l'expression (21.47) devient

$$D = D_0 \exp\left[-\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(U - E)} \right], \tag{21.48}$$

avec

$$D_0 = 16 \frac{E}{U} \left(1 - \frac{E}{U}\right).$$

A côté du coefficient de traversée, on définit un *coefficient de réflexion* de la barrière de potentiel, qui représente la part du flux

des particules ayant été réfléchies par la barrière: $R = j_{\text{rét}}/j_{\text{inc}}$. Il est évident que l'on doit avoir $D + R = 1$ (toutes les particules qui n'ont pas réussi à traverser la barrière de potentiel ont été réfléchies).

Considérons enfin le cas où la particule passe au-dessus de la barrière de potentiel ($E > U$). Dans ce cas au lieu de (21.39) on doit avoir

$$\begin{aligned} \varphi_1(x) &= \exp(ikx) + B_1 \exp(-ikx), \\ \varphi_2(x) &= A_2 \exp(iKx) + B_2 \exp(-iKx), \\ \varphi_3(x) &= A_3 \exp(ikx), \end{aligned} \tag{21.49}$$

où $K = \sqrt{2m(E-U)}/\hbar$.

En définissant, à l'aide de (21.49), les conditions aux limites correspondant aux points $x = 0$ et $x = a$ et en résolvant le système d'équations qui en résulte, nous pouvons calculer le coefficient B_1; connaissant ce coefficient et appliquant la formule (21.42), on détermine le coefficient de réflexion $R = j_{\text{rét}}/j_{\text{inc}}$, qui est égal à

$$R = \frac{(k^2-K^2)^2 \sin^2(Ka)}{4k^2K^2 + (k^2-K^2)^2 \sin^2(Ka)}. \tag{21.50}$$

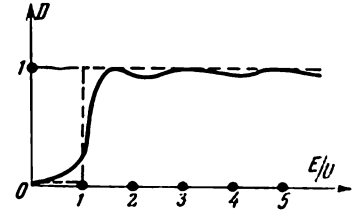


Fig. 21.4.

A l'aide de (21.47) et (21.50) on peut établir la dépendance du coefficient D avec la valeur du rapport E/U. La fig. 21.4 illustre l'allure de cette dépendance en pointillé on a représenté la dépendance de D avec E/U pour le cas d'une particule classique. La comparaison de la courbe en trait plein avec la ligne en pointillé laisse bien apparaître la spécificité du comportement quanto-mécanique des microparticules. Remarquons qu'en mécanique classique dans le cas où $E < U$ toutes les particules incidentes sont réfléchies par la barrière de potentiel, et aucune d'elles ne peut passer au travers. Lorsque $E > U$, d'après la mécanique classique toutes les particules doivent passer au-dessus de la barrière, tandis que d'après la mécanique quantique une partie passe au-dessus de la barrière et l'autre est réfléchie par elle. Aussi bien la *traversée de la barrière* pour $E < U$ que la *réflexion par la barrière* pour $E > U$ sont des effets spécifiquement quantiques.

§ 22. Formes du hamiltonien dans quelques problèmes particuliers

Oscillateur harmonique linéaire. Le hamiltonien est de la forme

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \tag{22.1}$$

[il résulte de (4.5) en tenant compte de (19.1) et (20.4)]. Les valeurs propres sont données par

$$E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right); \quad n=0,\ 1,\ 2,\ \ldots \tag{22.2}$$

[avec $n = 0$ la formule (22.2) donne l'énergie des oscillations de point zéro, dont nous avons donné une estimation au § 4 sur la base de la relation d'incertitude]. Les fonctions propres sont données par

$$\varphi_n(x) = \left(1/\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}}\right)^{-1/2} \sqrt[4]{m\omega/\hbar}\exp(-\xi^2/2)\,H_n(\xi), \tag{22.3}$$

avec $\xi = x\sqrt{m\omega/\hbar}$, $H_n(\xi)$ représente les *polynômes d'Hermite*. Ecrivons les expressions des premières fonctions $\varphi_n(x)$:

$$\varphi_0(x) = (x_0\sqrt{\pi})^{-1/2}\exp(-x^2/2x_0^2), \tag{22.4a}$$

$$\varphi_1(x) = (2x_0\sqrt{\pi})^{-1/2}\exp(-x^2/2x_0^2)\,2x/x_0, \tag{22.4b}$$

$$\varphi_2(x) = (8x_0\sqrt{\pi})^{-1/2}\exp(-x^2/2x_0^2)\left(4\frac{x^2}{x_0^2}-2\right) \tag{22.4c}$$

(avec $x_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$).

Remarque: les polynômes d'Hermite, les polynômes de Laguerre dont il sera question ci-dessous, de même que les fonctions sphériques et les polynômes de Legendre (§ 20) sont ce qu'on appelle des *fonctions spéciales*. De nombreux traités de mathématiques sont consacrés à l'étude et aux applications des fonctions spéciales (voir par exemple [36, 37]).

L'atome d'hydrogène. Le problème de l'atome d'hydrogène est un problème bien étudié du mouvement d'un électron dans un champ coulombien de symétrie sphérique. Le hamiltonien est

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e^2}{r} \tag{22.5}$$

[on l'obtient à partir de (4.1), de (19.1) et (20.6)]. Les valeurs propres de ce hamiltonien sont définies par une formule que le lecteur connaît bien [cf. (2.5)]

$$E_n = -me^4/2\hbar^2n^2; \quad n = 1,\ 2,\ 3,\ \ldots \tag{22.6}$$

Les fonctions propres du hamiltonien (22.5) peuvent être représentées par des expressions de la forme

$$\psi_{nlm} = R_{nl}(r)\,Y_{lm}(\theta,\ \varphi); \quad l=0,\ 1,\ \ldots,\ n-1;$$
$$m=0,\ \pm 1,\ \ldots,\ \pm l. \tag{22.7}$$

$Y_{lm}(\theta,\ \varphi)$ sont des fonctions sphériques qui déterminent le « terme angulaire » de la fonction d'onde, quelle que soit la forme concrète

du potentiel présentant une symétrie sphérique; $R_{nl}(r)$ est le « terme radial » de la fonction d'onde; elle se laisse déterminer à l'aide de l'équation (21.30) avec un potentiel coulombien $[U(r) = -e^2/r]$. Les fonctions $R_{nl}(r)$ sont de la forme

$$R_{nl}(r) = \text{const} \exp(r/r_1 n)(2r/r_1 n)^l L_{n+l}^{2l+1}(2r/r_1 n), \qquad (22.8)$$

où $r_1 = \hbar^2/me^2$ (le lecteur sait déjà que cette quantité représente le rayon de la première orbite de Bohr); L_{n+l}^{2l+1} représente les *polynômes généralisés de Laguerre* (voir, par exemple, [36]).

Nous avons donné au § 21 les expressions des premières fonctions sphériques [cf. (21.26)], ci-dessous nous donnons les expressions des premières fonctions $R_{nl}(r)$:

$$R_{10} = 2r_1^{-3/2} \exp(-r/r_1), \qquad (22.9a)$$

$$R_{20} = (2r_1^3)^{-1/2} \exp(-r/2r_1)\left(1 - \frac{r}{2r_1}\right), \qquad (22.9b)$$

$$R_{21} = (2\sqrt{6r_1^3})^{-1} \exp(-r/2r_1)\, r/r_1. \qquad (22.9c)$$

Lorsque nous avons introduit au § 5 la notion de « nuage électronique », nous y avions défini les fonctions v_{nl} et Z_{lm} et nous avions représenté sur la fig. 5.2, *a* l'allure de plusieurs fonctions $w_{nl}(r) = r^2 v_{nl}(r)$, et sur la fig. 5.2, *b* celle des fonctions Z_{lm}. En ce qui concerne les fonctions auxquelles nous avons affaire présentement, notons que $v_{nl} = R_{nl}^2(r)$ et $Z_{lm} = |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2$. On notera que (5.4) est conforme à (22.9a).

A l'aide de (22.9) et (21.26) nous pouvons écrire quelques fonctions propres du hamiltonien (22.5):

$$\psi_{100} = (\pi r_1^3)^{-1/2} \exp(-r/r_1), \qquad (22.10a)$$

$$\psi_{200} = (8\pi r_1^3)^{-1/2} \exp(-r/2r_1)\left(1 - \frac{r}{2r_1}\right), \qquad (22.10b)$$

$$\psi_{211} = (8\sqrt{\pi r_1^3})^{-1} \exp(-r/2r_1) \sin\theta e^{i\varphi} r/r_1, \qquad (22.10c)$$

$$\psi_{210} = (4\sqrt{2\pi r_1^3})^{-1} \exp(-r/2r_1) \cos\theta r/r_1. \qquad (22.10d)$$

La fonction (22.10a) caractérise l'état fondamental de l'atome d'hydrogène et les fonctions (22.10b)-(22.10c) décrivent les différents états excités correspondant au premier niveau d'énergie excité ($n = 2$).

La dégénérescence des niveaux d'énergie. La formule 22.6 montre que dans un atome d'hydrogène l'énergie de l'électron ne dépend que du nombre quantique n, ses états (les fonctions Ψ_{nlm}) étant déterminés par trois nombres quantiques: n, l, m. De plus, chaque fois que l'on considère les états de l'électron, on doit tenir compte du nombre quantique de spin σ, qui ne figure pas dans les formules que nous avons données. Le nombre quantique principal n étant donné, le nombre quantique orbital l prend toutes les valeurs

entières comprises entre 0 et $n-1$, et à chaque valeur de l correspondent $2l+1$ valeurs du nombre quantique magnétique m. A chacun des niveaux d'énergie E_n doit donc correspondre un nombre g_n d'états donné par l'expression suivante

$$g_n = 2\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = 2n^2 \tag{22.11}$$

(le facteur 2 figure pour tenir compte de l'existence de deux états de spin de l'électron). Cela signifie que la valeur propre E_n du hamiltonien (22.5) (autrement dit, le n-ième niveau d'énergie) *est dégénérée* $2n^2$ fois.

En règle générale, la dégénérescence des niveaux d'énergie est liée à la *symétrie* du système atomique considéré. Ainsi, par exemple, par suite de la symétrie sphérique des champs intra-atomiques, on a une dégénérescence par rapport aux nombres quantiques m et σ, ce qui veut dire que l'énergie ne dépend pas des orientations des moments orbital et de spin. La dégénérescence par rapport au nombre quantique l est liée aux particularités propres au potentiel coulombien; dans les champs non coulombiens l'énergie de l'électron dépend non seulement de la valeur de n mais aussi de celle de l.

La présence de champs de force, qu'ils soient internes ou externes, peut réduire la symétrie du système. Ainsi, par exemple, l'application d'un champ électrique extérieur fait apparaître une direction physiquement privilégiée et la symétrie sphérique cède la place à une symétrie cylindrique. La réduction de la symétrie donne lieu à une levée de la dégénérescence des niveaux (levée partielle ou complète). Cela se manifeste dans l'éclatement des niveaux d'énergie, en ce sens que les niveaux initiaux sont remplacés par un système d'autres niveaux, moins dégénérés. L'éclatement des niveaux d'énergie sous l'action d'un champ électrique extérieur porte le nom d'*effet Stark*, tandis que l'éclatement résultant de l'application d'un champ magnétique extérieur porte le nom d'*effet Zeeman*.

Cas d'un cristal dans l'approximation adiabatique. Le hamiltonien d'un cristal formé par N noyaux et ZN électrons est de la forme

$$\hat{H} = \frac{1}{2M}\sum_{i}^{N}\hat{P}_i^2 + \frac{1}{2m}\sum_{k}^{ZN}\hat{p}_k^2 + \\ + U_1(\{\vec{r}_k\}) + U_2(\{\vec{R}_i\}) + U_3(\{\vec{r}_k\},\ \{\vec{R}_i\}). \tag{22.12}$$

M est la masse du noyau, $\hat{\vec{P}}_i$ est l'opérateur de l'impulsion de l'i-ième noyau, m est la masse de l'électron, $\hat{\vec{p}}_k$ l'opérateur du k-ième électron, $\{\vec{r}_k\}$ est l'ensemble des coordonnées des électrons, $\{\vec{R}_i\}$

l'ensemble des coordonnées des noyaux. La fonction U_1 décrit les interactions mutuelles des électrons elle est de la forme

$$U_1 = \frac{1}{2} \sum_{k \neq l} \sum e^2/r_{kl}, \tag{22.13}$$

où r_{kl} est la distance de séparation des k-ième et l-ième électrons. La fonction U_2 décrit les interactions mutuelles des noyaux et la fonction U_3 l'interaction des noyaux et des électrons *.

Mettant à profit le fait que $M \gg m$, ce qui implique que les noyaux se meuvent beaucoup plus lentement que les électrons, on peut considérer ces mouvements *séparément*: considérant le mouvement des électrons, on peut poser que les noyaux sont immobiles, et considérant le mouvement des noyaux, poser que le collectif électronique crée un champ moyen indépendant des coordonnées des différents électrons. Dans ces conditions la fonction d'onde du cristal peut être présentée sous forme du produit des fonctions « nucléaire » et « électronique » :

$$\psi_c(\{r_k\}, \{\vec{R}_l\}) = \Psi(\{\vec{R}_l\})\, \varphi_c(\{\vec{r}_k\}). \tag{22.14}$$

Le hamiltonien (22.12) peut alors être subdivisé en un hamiltonien « nucléaire » $\hat{H}_1$ et un hamiltonien «électronique » $\hat{H}_2$:

$$\hat{H}_1 = \frac{1}{2M} \sum_{i}^{N} \hat{P}_i^2 + U_2(\{\vec{R}_l\}) \tag{22.15}$$

$$\hat{H}_2 = \frac{1}{2m} \sum_{k} \hat{p}_k^2 + \frac{1}{2} \sum_{k \neq l} \sum \frac{e^2}{r_{kl}} + U_3(\{r_k\}). \tag{22.16}$$

La fonction U_3 décrit l'énergie potentielle des électrons par rapport au champ créé par des noyaux immobilisés dans les noeuds du réseau cristallin.

En procédant ainsi, au lieu d'avoir à résoudre l'équation de Schrödinger rapportée au cristal tout entier

$$\hat{H}\psi_c(\{\vec{r}_k\}, \{\vec{R}_l\}) = E^{cr}\psi(\{\vec{r}_k\}, \{\vec{R}_l\}), \tag{22.17}$$

ce qui est une tâche fort ardue, on peut se contenter de résoudre deux équations plus simples:

a) l'équation relative aux noyaux (donc relative au réseau cristallin)

$$\hat{H}_1 \Psi(\{\vec{R}_l\}) = E^{r}\Psi(\{\vec{R}_l\}), \tag{22.18}$$

* Les fonctions U_1, U_2, U_3 qui décrivent les différents potentiels d'interaction sont en fait des opérateurs donnés dans la représentation en coordonnées.

b) l'équation relative aux électrons:

$$\hat{H}_2\varphi_e(\{\vec{r}_k\}) = E^e\varphi_e(\{\vec{r}_k\}), \tag{22.19}$$

avec $E^{cr} = E^r + E^e$. Cette approximation est désignée sous le nom d'*approximation adiabatique*.

En conclusion nous devons apporter quelques précisions importantes. Lorsqu'on utilise l'approximation adiabatique, on prend en considération non pas les noyaux proprement dits, mais les noyaux entourés d'électrons qui y sont solidement liés. Lorsqu'on dit que l'on a affaire à un collectif d'électrons, on a en vue non pas la totalité des électrons mais seulement ceux qui sont « collectivisés » par le cristal (ce sont donc les électrons qui se déplacent à travers le réseau cristallin, par exemple, les électrons de conduction).

Approximation monoélectronique. En mettant en œuvre l'approximation adiabatique, nous allons considérer le mouvement des électrons « collectivisés » par le cristal en négligeant la dynamique du réseau cristallin. Utilisons l'équation (22.16) en remarquant que la fonction $U_3(\{\vec{r}_k\})$ peut être présentée sous la forme d'une somme sur les électrons « collectivisés » (puisque chacun de ces électrons interagit avec le champ du réseau indépendamment de tous les autres): $U_3(\{\vec{r}_k\}) = \sum_k U_4(\vec{r}_k)$. Dans ces conditions le hamiltonien « électronique » (22.16) se présente sous la forme suivante

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\sum_k \hat{p}_k^2 + \frac{1}{2}\sum_{k\neq l}\sum \frac{e^2}{r_{kl}} + \sum_k U_4(\vec{r}_k). \tag{22.20}$$

On peut encore simplifier le problème en supposant que le terme $\frac{1}{2}\sum_k\sum_l e^2/r_{kl}$ figurant dans (22.20) peut être remplacé par une somme sur les électrons:

$$\frac{1}{2}\sum_{k\neq l}\sum \frac{e^2}{r_{kl}} \approx \sum_k U_5(\vec{r}_k). \tag{22.21}$$

Cela veut dire que lorsqu'on considère les interactions mutuelles des électrons, on suppose que chacun des électrons se meut dans un certain champ qui est le même pour toute la collectivité des électrons (champ dit autocongruent). De ce fait le hamiltonien de la collectivité électronique se subdivise en une somme de hamiltoniens « monoélectroniques ». On peut alors présenter la fonction d'onde de cette collectivité sous forme d'un produit de fonctions « monoélectroniques » [que nous désignerons par $\varphi(\vec{r}_k)$]; l'équation de Schrödinger relative à la collectivité électronique se trans-

forme alors en un ensemble d'équations « monoélectroniques » telles que

$$\left[\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}+U_4(\vec{r})+U_5(\vec{r})\right]\varphi(\vec{r})=E\varphi(\vec{r}). \qquad (22.22)$$

$\vec{p}$ et $\vec{r}$ représentent ici l'opérateur de l'impulsion et la coordonnée de l'un des électrons « collectivisés »; E est l'énergie de cet électron-là.

Sur la base de ces considérations, utilisant (22.21), on peut remplacer l'étude de la collectivité des électrons par celle d'un seul électron se mouvant dans le champ défini par:

$$U(\vec{r})=U_4(\vec{r})+U_5(\vec{r}). \qquad (22.23)$$

Cette approche constitue ce qu'il est convenu d'appeler l'*approximation monoélectronique* (à un seul électron).

Le potentiel $U(\vec{r})$ est *périodique* de période égale à celle du réseau cristallin. Nous démontrerons au § 24 que l'énergie d'un électron en mouvement dans un champ périodique présente alternativement des bandes de valeurs permises et de valeurs interdites, et se caractérise donc par *une structure de bandes*. Un électron lié à un atome possède des niveaux d'énergie, un électron libre présente un spectre d'énergie continu. Un électron « collectivisé » par le cristal se trouve, pour ainsi dire, dans une situation intermédiaire, il n'est « libre » qu'à l'intérieur du cristal. La structure de bandes des états énergétiques d'un tel électron est intermédiaire entre la structure de niveaux discrets et le spectre continu.

La liberté relative avec laquelle un électron « collectivisé » se meut au sein du cristal se répercute sur sa fonction d'onde qui se présente sous la forme d'une *fonction* dite *de Bloch*:

$$\varphi(\vec{r})=u(\vec{r})\exp(i\vec{p}\,\vec{r}/\hbar). \qquad (22.24)$$

C'est la fonction d'onde (15.15) d'un électron libre, mais modulée par la fonction $u(\vec{r})$ ayant la même période que le potentiel $U(\vec{r})$ (pour plus de détails sur les fonctions de Bloch voir § 24).

Hamiltonien d'interaction d'un électron avec un rayonnement électromagnétique. Nous allons étudier un système constitué par *un électron lié et un rayonnement électromagnétique*. Dans le cas où il n'y a pas d'interaction entre eux, le système est décrit par un hamiltonien « non perturbé »:

$$\hat{H}_0=\frac{\hat{p}^2}{2m}+U+\hat{H}_\gamma, \qquad (22.25)$$

où $\hat{p}^2/2m+U$ est le hamiltonien de l'électron et $\hat{H}_\gamma$ le hamiltonien du rayonnement. S'il y a interaction entre l'électron et le rayon-

nement, le système est décrit par un hamiltonien « perturbé »

$$\hat{H} = \left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 \Big/ 2m + U + \hat{H}_\gamma, \tag{22.26}$$

où $\vec{A}$ est l'opérateur du potentiel vecteur du champ de radiation [rappelons que dans la représentation en coordonnées $\hat{\vec{A}}(\vec{r}) = \vec{A}(\vec{r})$] *. On remarquera que les potentiels du champ sont choisis de telle sorte que soient remplies les conditions de normation : div $\vec{A} = 0$; $\varphi = 0$ (φ est le potentiel scalaire du champ). Nous mettrons le hamiltonien $\hat{H}$ sous la forme suivante

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}', \tag{22.27}$$

$\hat{H}'$ étant le hamiltonien d'interaction qui joue ici le rôle de perturbation. En comparant (22.25), (22.26) et (22.27), on voit que

$$\hat{H}' = -\frac{e}{2mc}\left[(\hat{\vec{p}}\vec{A}) + (\vec{A}\hat{\vec{p}})\right] + \frac{e^2}{2mc^2}A^2. \tag{22.28}$$

On peut simplifier cette formule en remarquant que d'après (20.27) $\hat{\vec{p}}\vec{A}(\vec{r}) - \vec{A}(\vec{r})\hat{\vec{p}} = -i\hbar \operatorname{div}\vec{A}(\vec{r})$. Or comme div $A = 0$, on aura

$$\hat{H}' = -\frac{e}{mc}(\hat{\vec{p}}\vec{A}) + \frac{e^2}{2mc^2}A^2. \tag{22.29}$$

Le hamiltonien (22.29) détermine tous les phénomènes d'absorption et d'émission (spontanée ou induite) de photons par un électron.

§ 23. Utilisation de la représentation en impulsion

Nous montrerons comment s'effectue le passage de la représentation en coordonnées à la représentation en impulsion, puis nous présenterons quelques résultats dans cette dernière représentation.

Les opérateurs de l'impulsion et de la coordonnée dans la représentation en impulsion. Il est clair que dans la représentation en impulsion l'opérateur de l'impulsion est l'impulsion elle-même

$$\hat{p}_x = p_x; \quad \hat{\vec{p}} = \vec{p}. \tag{23.1}$$

Nous pouvons donc passer à l'étude de la coordonnée x.

Supposons que l'amplitude d'état nous soit donnée dans la représentation en coordonnées par la fonction $\varphi(x)$ et dans la re-

* On démontre dans la théorie des champs classique [38] que l'on arrive à tenir compte de l'interaction d'une charge avec le champ électromagnétique en procédant à la substitution : $\vec{p} \to \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}$. Nous utilisons ici ce résultat classique en remplaçant les variables dynamiques par les opérateurs correspondants.

présentation en impulsion par la fonction $\Phi(p_x)$. En vertu de (17.33) nous pouvons écrire

$$\int \varphi^*(x)\,\hat{x}(x)\,\varphi(x)\,dx = \int \Phi^*(p_x)\,\hat{x}(p_x)\,\Phi(p_x)\,dp_x. \qquad (23.2)$$

D'après (15.6) la relation entre $\varphi(x)$ et $\Phi(p_x)$ est de la forme

$$\varphi(x) = \int \Phi(p_x)\,\psi_{p_x}(x)\,dp_x, \qquad (23.3)$$

où $\psi_{p_x}(x)$ sont les fonctions propres de l'opérateur p_x dans la représentation en coordonnées. En utilisant (20.9), nous pouvons transcrire (23.3) comme suit

$$\varphi(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int \Phi(p_x) \exp(ip_x x/\hbar)\,dp_x. \qquad (23.4)$$

Portons (23.4) dans le premier membre de (23.2 il vient

$$\int \varphi^*(x)\,x\varphi(x)\,dx =$$
$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int\int\int \Phi^*(p'_x)\,e^{-ip'_x x/\hbar}\,x\Phi(p_x)\,e^{ip_x x/\hbar}\,dp'_x\,dp_x\,dx. \qquad (23.5)$$

Le facteur $x\Phi(p_x)\exp(ip_x x/\hbar)$ figurant dans la quantité sous le signe intégrale de (23.5) se laisse écrire comme suit

$$x\Phi(p_x)\exp(ip_x x/\hbar) = -i\hbar\frac{d}{dp_x}[\Phi\exp(ip_x x/\hbar)] +$$
$$+ i\hbar\frac{d\Phi}{dp_x}\exp(ip_x x/\hbar). \qquad (23.6)$$

Portons (23.6) dans (23.5) et considérons l'intégrale par rapport à p_x. Nous devons tenir compte de ce que

$$-i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d}{dp_x}[\Phi\exp(ip_x x/\hbar)]\,dp_x = -i\hbar\Phi(p_x)\exp(ip_x x/\hbar)\Big|_{-\infty}^{\infty} = 0$$

[puisqu'il est physiquement impossible de réaliser une impulsion infiniment grande, on doit avoir $\Phi(\infty) = 0$ et $\Phi(-\infty) = 0$]. Par suite, dans l'intégrale en p_x ne doit subsister dans le deuxième membre de (23.6) que le deuxième terme: $i\hbar\frac{d\Phi}{dp_x}\exp(ip_x x/\hbar)$. L'égalité (23.5) s'écrira donc

$$\int \varphi^*(x)\,x\varphi(x)\,dx =$$
$$= \frac{1}{2\pi\hbar}\int\int\int \Phi^*(p'_x)\,i\hbar\exp[i(p_x - p'_x)x/\hbar]\,\frac{d\Phi(p_x)}{dp_x}\,dp'_x\,dp_x\,dx. \qquad (23.7)$$

L'intégration par rapport à x dans le second membre de cette dernière égalité fournit conformément à (15.17) le résultat suivant

$$(2\pi\hbar)^{-1} \int \exp\left[i\left(p_x - p'_x\right) x/\hbar\right] dx = \delta\left(p_x - p'_x\right).$$

En utilisant les propriétés de la fonction delta, nous pouvons intégrer par rapport à p'_x:

$$\int \Phi^*\left(p'_x\right) \delta\left(p_x - p'_x\right) dp'_x = \Phi^*\left(p_x\right).$$

Ne subsiste donc que l'intégrale par rapport à p_x et l'égalité (23.7) se présente comme suit

$$\int \varphi^*(x)\, x\varphi(x)\, dx = \int \Phi^*\left(p_x\right) i\hbar \frac{d}{dp_x} \Phi\left(p_x\right) dp_x. \qquad (23.8)$$

En identifiant les seconds membres de (23.8) et (23.2), nous obtenons l'expression de l'opérateur de la coordonnée x dans la représentation en impulsion

$$\hat{x}\left(p_x\right) = i\hbar \frac{d}{dp_x}. \qquad (23.9)$$

Dans le cas tridimensionnel nous aurons

$$\hat{\vec{r}}\left(\vec{p}\right) = i\hbar \nabla_{\vec{p}}, \qquad (23.10)$$

où $\nabla_{\vec{p}}$ représente le gradient dans l'espace des impulsions.

Invariance unitaire des corrélations de commutation. Si on met en œuvre les formules (23.1) et (23.9), on peut constater que les commutateurs des opérateurs des composantes de la coordonnée et de l'impulsion seront exactement les mêmes dans les représentations en impulsion et en coordonnées [il s'agit des formules (20.24)-(20.26)]. Cette conclusion peut être étendue aux formules (20.27)-(20.30). Cela signifie que les relations de commutation ne dépendent pas de la représentation utilisée et sont donc des *invariants unitaires*. Ce résultat est évident puisque l'opérateur mathématique de commutation des opérateurs a une signification physique bien déterminée et qui ne peut évidemment changer lorsqu'on passe d'une représentation à une autre.

L'équation de Schrödinger dans la représentation en impulsion. Pour passer à la représentation en impulsion, commençons par transcrire l'équation (20.11) sous la forme suivante

$$\hat{H}\left(p_x\right) \tau_E\left(p_x\right) = E\tau_E\left(p_x\right), \qquad (23.11)$$

où $\tau_E\left(p_x\right)$ sont les fonctions propres du hamiltonien dans la représentation en impulsion. On notera que E a les mêmes valeurs dans (23.11) que dans (20.11), cela pour la raison que le spectre des valeurs

propres d'un opérateur hermitien est un invariant unitaire. Comme dans la représentation en impulsion $\hat{p}_x = p_x$ et $\hat{x} = i\hbar \frac{d}{dp_x}$, le hamiltonien (20.12) s'écrit maintenant

$$\hat{H}(p_x) = \frac{p_x^2}{2m} + U\left(i\hbar \frac{d}{dp_x}\right). \tag{23.12}$$

Par conséquent, à la place de l'équation (20.13) nous aurons l'équation

$$\left(\frac{p_x^2}{2m} - E\right)\tau_E(p_x) + U\left(i\hbar \frac{d\tau_E}{dp_x}\right) = 0. \tag{23.13}$$

C'est l'*équation de Schrödinger indépendante du temps dans la représentation en impulsion.*

A titre d'exemple écrivons le hamiltonien d'un oscillateur harmonique linéaire:

$$\hat{H}(p_x) = \frac{p_x^2}{2m} - \frac{m\omega^2\hbar^2}{2}\frac{d^2}{dp_x^2}. \tag{23.14}$$

Nous invitons le lecteur à confronter cette dernière équation avec l'équation (22.1) décrivant le même hamiltonien mais donné dans la représentation en coordonnées.

La représentation en impulsion permet d'établir aisément un résultat que le lecteur connaît déjà. Si une microparticule est en mouvement libre, l'équation (23.13) se réduit tout naturellement à

$$\left(\frac{p_x^2}{2m} - E\right)\tau_E(p_x) = 0; \tag{23.15}$$

il en résulte aussitôt que

$$E = p_x^2/2m. \tag{23.16}$$

Nous avons signalé cette formule dès le premier paragraphe. Elle signifie qu'une particule en mouvement libre présente simultanément et une énergie et une impulsion bien déterminées, ces deux grandeurs étant liées entre elles par la formule classique (23.16). Dans le cas d'un mouvement libre l'état stationnaire de la microparticule est lui aussi une fonction propre de l'opérateur de l'impulsion. On remarquera que ce résultat ne peut être étendu à des microparticules liées (voir l'exemple donné ci-dessous).

Valeurs probables de l'impulsion d'une microparticule se trouvant dans un puits de potentiel de forme rectangulaire infiniment profond. Au § 21 nous avons étudié dans la représentation en coordonnée le problème du mouvement d'une microparticule dans un puits de potentiel monodimensionnel de forme rectangulaire infiniment

profond. On a déterminé les niveaux d'énergie (21.8) et les amplitudes orthonormées des états stationnaires (21.9).

Lorsqu'on passe à la représentation en impulsion, le résultat (21.8) ne doit évidemment pas changer, mais le résultat (21.9) s'en trouvera modifié. La détermination des amplitudes des états stationnaires dans la représentation en impulsion permet notamment de calculer les valeurs probables de l'impulsion d'une microparticule se trouvant dans le nième état d'énergie. Désignons ces amplitudes par $\tau_n(p_x)$; la probabilité à déterminer sera $|\tau_n(p_x)|^2$.

Les amplitudes $\tau_n(p_x)$ sont liées aux amplitudes d'états stationnaires données dans la représentation en coordonnées [amplitudes $\varphi_n(x)$] par une corrélation de superposition de même type que (23.3):

$$\tau_n(p_x) = \int \varphi_n(x)\,\psi'_x(p_x)\,dx, \tag{23.17}$$

où $\psi'_x(p_x)$ sont les fonctions propres de l'opérateur $\hat{x}$ dans la représentation en impulsion. En remarquant que $\psi'_x(p_x) = \psi^*_{px}(x)$ et en utilisant (20.9), nous pouvons mettre (23.17) sous la forme

$$\tau_n(p_x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int_0^a \varphi_n(x) \exp(-ip_x x/\hbar)\,dx. \tag{23.18}$$

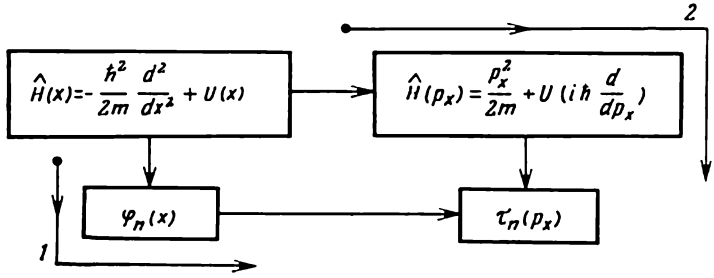
En y portant (21.9) et en intégrant le résultat, on arrive en définitive à l'expression suivante de la probabilité

$$|\tau_n(p_x)|^2 = \frac{[4\pi a n^2]}{\hbar\left(\pi^2 n^2 - \frac{p_x^2 a^2}{\hbar^2}\right)^2} \begin{cases} \cos^2\left(\frac{p_x a}{2\hbar}\right), & n \text{ impair} \\ \sin^2\left(\frac{p_x a}{2\hbar}\right), & n \text{ pair.} \end{cases} \tag{23.19}$$

Ainsi on a démontré de façon rigoureuse que les états stationnaires (niveaux d'énergie) d'une microparticule se trouvant dans un puits de potentiel ne présentent pas des impulsions bien déterminées et par suite ne peuvent être caractérisés par une longueur déterminée de l'onde de De Broglie. Rappelons que nous avons déjà considéré ce résultat de manière qualitative au § 5, où nous avions souligné qu'il était incorrect d'essayer de visualiser une microparticule liée par le modèle d'une onde classique dans une cavité résonnante.

« Schéma » du passage de la représentation en coordonnées à la représentation en impulsion. En guise de conclusion nous estimons

utile de donner le « schéma » suivant illustrant le passage d'une représentation à l'autre :



Ce « schéma » suppose deux procédés de passage. Le *premier* consiste à résoudre l'équation de Schrödinger avec le hamiltonien $\hat{H}(x)$ et à déterminer les amplitudes des états stationnaires dans la représentation en coordonnées $\varphi_n(x)$; après cela, à l'aide de la corrélation de superposition (23.17), on passe des amplitudes $\varphi_n(x)$ aux amplitudes $\tau_n(p_x)$. C'est le procédé que nous avons utilisé ci-dessus. On peut cependant utiliser un *autre* procédé : on passe de $\hat{H}(x)$ à $\hat{H}(p_x)$, puis on résout l'équation de Schrödinger écrite dans la représentation en impulsion (23.13). La détermination des amplitudes $\tau_n(p_x)$ se ramène dans ce cas à la résolution de l'équation (23.13).

§ 24. L'électron dans un champ périodique

Le problème quanto-mécanique du comportement de l'électron dans un champ périodique joue un rôle de premier plan dans la théorie du solide. Nous traiterons ce problème en utilisant l'approximation monoélectronique qui a été définie dans le § 22.

Structure de bandes du spectre d'énergie. Les zones de Brillouin. Considérons un potentiel *périodique* unidimensionnel $U(x)$ satisfaisant à la condition

$$U(x+a) = U(x). \tag{24.1}$$

Passons à la représentation en impulsion en utilisant le deuxième procédé décrit dans le paragraphe précédent. Cela signifie qu'on doit mettre le potentiel $U(x)$ sous la forme d'un opérateur donné dans la représentation en impulsion $\hat{U}(p_x)$ (pour abréger l'écriture, nous écrirons dorénavant p pour p_x).

Développons la fonction périodique (24.1) en une série de Fourier

$$U(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} U_n \exp(-i2\pi nx/a),$$

passant ensuite à la représentation en impulsion, nous écrirons

$$\hat{U}(p)=\sum_{n=-\infty}^{\infty} U_n \exp\left(\frac{2\pi n\hbar}{a}\frac{d}{dp}\right). \tag{24.2}$$

Montrons maintenant que l'opérateur $\exp\left(p_1\frac{d}{dp}\right)$ est l'opérateur d'une translation finie égale à $p = p_1$ dans l'espace des impulsions. Effectivement on a

$$\tau(p+p_1)=\tau(p)+p_1\frac{d\tau}{dp}(p)+\frac{1}{2!}p_1^2\frac{d^2\tau}{dp^2}(p)+\ldots=$$
$$=\left[1+p_1\frac{d}{dp}+\frac{1}{2!}p_1^2\frac{d^2}{dp^2}+\ldots\right]\tau(p)=\exp\left(p_1\frac{d\tau}{dp}\right).$$

On a donc

$$\exp\left(p_1\frac{d\tau}{dp}\right)=\tau(p+p_1). \tag{24.3}$$

De (24.2) et (24.3) il s'ensuit que

$$\hat{U}(p)\tau(p)=\sum_{n=-\infty}^{\infty} U_n(\tau)\left(p+\frac{2\pi\hbar}{a}n\right). \tag{24.4}$$

Utilisant (24.4), écrivons l'équation de Schrödinger (23.13) sous la forme

$$\left(\frac{p^2}{2m}-E\right)\tau(p)+\sum_{n=-\infty}^{\infty} U_n(\tau)\left(p+\frac{2\pi\hbar n}{a}\right)=0. \tag{24.5}$$

En fait (24.5) est un système homogène d'équations linéaires en $\tau(p)$, $\tau(p-2\pi\hbar/a)$, $\tau(p+2\pi\hbar/a)$, etc... Ce système comporte dans le cas général un nombre infini d'équations :

$$\left.\begin{aligned}
&\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\\
&\left[\frac{(p+2\pi\hbar/a)^2}{2m}-E\right]\tau\left(p+\frac{2\pi\hbar}{a}\right)+\\
&\qquad+\sum_n U_n\tau\left(p+\frac{2\pi\hbar(n+1)}{a}\right)=0,\\
&\left[\frac{p^2}{2m}-E\right]\tau(p)+\sum_{n=-\infty}^{\infty} U_n\tau\left(p+\frac{2\pi\hbar n}{a}\right)=0,\\
&\left[\frac{(p-2\pi\hbar/a)^2}{2m}-E\right]\tau\left(p-\frac{2\pi\hbar}{a}\right)+\\
&\qquad+\sum_n U_n\tau\left(p+\frac{2\pi\hbar(n-1)}{a}\right)=0.\\
&\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots
\end{aligned}\right\} \tag{24.6}$$

Pour un système homogène, les solutions différentes de zéro n'existent que si son déterminant est égal à zéro. Désignons ce déterminant par le symbole $D(E, p)$ et écrivons

$$D(E, p) = 0. \tag{24.7}$$

Fixons une valeur de p (soit $p = p_1$) et désignons les racines de l'équation (24.7) par: $E_1(p_1)$, $E_2(p_1)$, $E_3(p_1)$, ... Pour une autre valeur de p ($p = p_2$), on aura d'autres racines: $E_1(p_2)$, $E_2(p_2)$, $E_3(p_2)$, ... Après avoir adopté une série de valeurs de p, nous aboutissons à une famille de fonctions définies par l'équation (24.7):

$$E_1(p),\ E_2(p),\ E_3(p),\ \ldots,\ E_j(p),\ \ldots \tag{24.8}$$

Pour chacune des valeurs de l'indice j l'énergie est une fonction continue de l'impulsion. En supposant que ces fonctions sont limitées, nous écrirons pour l'indice j:

$$E_j^{\min} \leqslant E_j(p) \leqslant E_j^{\max}. \tag{24.9}$$

Les inégalités (24.9) incluent les valeurs de l'énergie de la microparticule qui toutes ensemble forment la j-ième bande d'énergie. Si l'on a

$$E_{j-1}^{\max} < E_j^{\min},$$

cela signifie qu'entre les $(j-1)$-ième et j-ième bandes d'énergie apparaît une région de valeurs d'énergie ne pouvant être réalisées. On appelle cette région bande interdite.

Nous voyons ainsi que le spectre d'énergie d'un électron se trouvant soumis à un champ périodique doit comporter une succession de *bandes d'énergie*, dont certaines peuvent être séparées les unes des autres par des bandes interdites. A l'intérieur de chaque bande l'énergie varie de façon continue et on la décrit à l'aide d'une fonction continue $E_j(p)$.

Lorsqu'on remplace p par $p + 2\pi\hbar n/a$, le système (24.6) reste identique à lui-même. Il s'ensuit que

$$E_j\left(p + \frac{2\pi\hbar n}{a}\right) = E_j(p). \tag{24.10}$$

Puisque cette substitution ne modifie en rien la situation physique, on dit que l'impulsion p présente des valeurs physiquement distinctes à l'intérieur d'une région dont les limites sont

$$-\pi\hbar/a \leqslant p \leqslant \pi\hbar/a. \tag{24.11}$$

Cela signifie que l'espace p des impulsions se trouve subdivisé en des régions d'une étendue égale à $2\pi\hbar/a$ et qu'il convient donc de n'étudier les variations de p qu'à l'intérieur d'une seule région. Ces régions portent le nom de *zones de Brillouin*. Dans le cas considéré on a affaire à des zones de Brillouin unidimensionnelles. Dans le

cas général les zones de Brillouin sont tridimensionnelles et présentent souvent une configuration compliquée, déterminée par les particularités du champ périodique considéré.

La structure de bandes des spectres d'énergie est caractéristique pour les électrons en mouvement dans les champs périodiques des réseaux cristallins. Les concepts de bandes d'énergie et de zones de Brillouin forment la base de la théorie électronique moderne des corps solides [39, 40].

Les fonctions de Bloch. Considérons la j-ième bande d'énergie. La fig. 24.1 représente de manière conventionnelle la dépendance $E_j(p)$ dans cette bande.

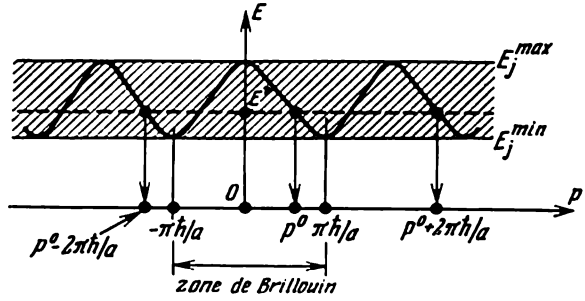


Fig. 24.1.

Choisissons une certaine valeur E^0 de l'énergie afférent à cette bande et désignons par p^0 la valeur correspondante de l'impulsion pour le cas d'un mouvement de gauche à droite. Désignons par $\tau_j^0(p)$ la fonction d'onde de l'état stationnaire que nous avons choisi. Il est facile de se rendre compte que cette fonction n'est différente de zéro que pour $p = p^0 + 2\pi\hbar n/a$ [on voit sur la figure que ce n'est qu'en ces points que la courbe $E_j(p)$ est interceptée par la droite $E = E^0$]. On peut donc exprimer la fonction $\tau_j^0(p)$ sous la forme suivante

$$\tau_j^0(p) = \sum_n \Omega(p)\,\delta\left(p^0 + \frac{2\pi\hbar n}{a} - p\right). \tag{24.12}$$

Passons maintenant à la représentation en coordonnées à l'aide de la règle (23.4):

$$\varphi_j^0(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \tau_j^0(p) \exp(ipx/\hbar)\,dp.$$

En y portant (24.12) on obtient

$$\varphi_j^0(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \sum_n \Omega\left(p^0 + \frac{2\pi\hbar n}{a}\right) \exp\left[i\left(p^0 + \frac{2\pi\hbar n}{a}\right) x/\hbar\right].$$

En introduisant la notation

$$(2\pi\hbar)^{-1/2} \sum_n \Omega\left(p^0 + \frac{2\pi\hbar n}{a}\right) \exp\left(i\,\frac{2\pi n x}{a}\right) = u_j^0(x), \tag{24.13}$$

nous pouvons transcrire le résultat précédent comme suit

$$\varphi_j^0(x) = u_j^0(x) \exp(ip^0x/\hbar).$$

On ne connaît pas la forme explicite de la fonction $u_j^0(x)$ [puisqu'on ne connaît pas la forme explicite de la fonction $U(x)$]. Il apparaît cependant de (24.13) que la fonction $u_j^0(x)$ est périodique avec une période de champ égale à

$$u_j^0(x+\hbar) = u_j^0(x). \tag{24.14}$$

Par conséquent, la fonction d'onde de l'état stationnaire défini par les indices j et p se présente dans la représentation en coordonnées sous la forme suivante [cf. (22.24)]

$$\varphi_{jp}(x) = u_{jp}(x) \exp(ipx/\hbar). \tag{24.15}$$

Cette équation représente une onde plane [$\exp(ipx/\hbar)$] dont l'amplitude [$u_{jp}(x)$] est périodique avec la même période que celle du champ. Dans la littérature scientifique les fonctions (24.15) sont connues sous le nom de *fonctions de Bloch*.

Le potentiel de Kronig-Penney. Etudions le mouvement d'une microparticule dans un champ dont la variation de potentiel est illustrée par la fig. 24.2 (potentiel dit de Kronig-Penney). C'est le cas le plus simple d'un potentiel périodique.

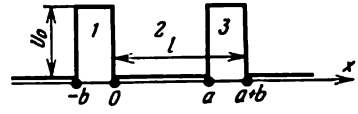


Fig. 24.2.

On discerne sur la fig. 24.2 trois régions distinctes. En posant d'abord que $E > U_0$ écrivons les solutions de l'équation de Schrödinger (20.13) pour les trois régions: région *1*

$$\varphi_1(x) = A_1 \exp(ik_1x) + B_1 \exp(-ik_1x);$$

$$k_1 = \sqrt{2m(E - U_0)}/\hbar;$$

région 2

$$\varphi_2(x) = A_2 \exp(ik_2x) + B_2 \exp(-ik_2x);$$

$$k_2 = \sqrt{2mE}/\hbar.$$

Pour la région *3* la solution peut être déduite de la solution pour la région *1* en mettant à profit les résultats que nous avons obtenus dans ce qui précède. Choisissons un point x de la région *3*. D'après (24.15) nous avons

$$\varphi_3(x) = u(x) \exp(ipx/\hbar). \tag{24.16}$$

A ce point correspond le point symétrique $x - l$ de la première région. Pour le point $x - l$ nous avons

$$\varphi_1(x - l) = u(x - l) \exp[ip(x - l)/\hbar].$$

Conformément à (24.14) nous pouvons mettre cette égalité sous la forme

$$\varphi_1(x - l) = u(x) \exp[ip(x - l)/\hbar]. \tag{24.17}$$

Nous tirons de (24.16) et (24.17) $\varphi_3(x)\exp(-ipx/\hbar) = \varphi_1(x-l) \times \times \exp(-ipx/\hbar)\exp(ipl/\hbar)$ et nous obtenons finalement

$$\varphi_3(x) = \exp(ipl/\hbar\,[A_1 \exp[ik_1(x-l)] + + B_1 \exp[-ik_1(x-l)]]. \quad (24.18)$$

En utilisant (24.18) et les expressions de φ_1 et φ_2 nous pouvons définir les conditions de continuité de la fonction d'onde et de la première dérivée aux points où se produit un saut de potentiel (aux points $x = 0$, $x = a$). Ces conditions de continuité forment un système linéaire d'équations pour les coefficients A_1, B_1, A_2, B_2:

$$\left.\begin{aligned} &A_1 + B_1 = A_2 + B_2, \\ &A_1 \exp(ik_2a) + B_1 \exp(-ik_2a) = \\ &\quad = \exp(ipl/\hbar)\,[A_1 \exp(-ik_1b) + B_1 \exp(ik_1b)], \\ &k_1A_1 - k_1B_1 = k_2A_2 - k_2B_2, \\ &k_2\,[A_2 \exp(ik_2a) - B_2 \exp(-ik_2a)] = \\ &\quad = \exp(ipl/\hbar)\,[A_1 \exp(-ik_1b) - B_1 \exp(ik_1b)]k_1. \end{aligned}\right\}$$

En égalant à zéro le déterminant du système, on arrive à l'équation suivante (nous mettons les calculs intermédiaires):

$$\cos(pl/\hbar) = \cos(k_2a)\cos(k_1b) - \frac{k_1^2+k_2^2}{2k_1k_2}\sin(k_2a)\sin(k_1b). \quad (24.19)$$

Comme en module le cosinus ne peut être plus grand que 1, on arrive à la condition imposée aux valeurs de k_1 et k_2 et par suite à celle de E:

$$-1 \leqslant \left[\cos(k_2a)\cos(k_1b) - \frac{k_1^2+k_2^2}{2k_1k_2}\sin(k_2a)\sin(k_1b)\right] \leqslant 1. \quad (24.20)$$

Cette condition détermine les bandes d'énergies permises.

Considérons maintenant le cas où $E < U_0$.

Dans ce cas k_1 est une quantité imaginaire. Posons $k_1 = ik_3$ avec $k_3 = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar$. Puisqu'en remplaçant k_1 par ik_3 le cosinus et le sinus deviennent respectivement un cosinus et un sinus hyperboliques [(cos $(k_1b) \to$ ch (k_3b) ; sin $(k_1b) \to i$sh (k_3b)], nous pouvons utiliser (24.19) qui s'écrit ici

$$\cos\left(\frac{pl}{\hbar}\right) = \cos(k_2a)\,\mathrm{ch}(k_3b) + \frac{k_3^2-k_2^2}{2k_2k_3}\sin(k_2a)\,\mathrm{sh}(k_3b). \quad (24.21)$$

La condition (24.20) définissant les bandes d'énergie s'écrira en conséquence sous la forme

$$-1 \leqslant \left[\cos(k_2a)\,\mathrm{ch}(k_3b) + \frac{k_3^2-k_2^2}{2k_2k_3}\sin(k_2a)\,\mathrm{sh}(k_3b)\right] \leqslant 1. \quad (24.22)$$

Considérons un cas particulier où

$$b \ll a\ (a \approx l);\ E \ll U_0 \quad (24.23)$$

(les barrières de potentiel sont étroites et de grande hauteur.) Comme b peut devenir aussi petit que l'on veut, on peut exiger que soit également valable l'inégalité

$$b\sqrt{2mU_0}/\hbar \ll 1, \quad \text{ou} \quad k_3 b \ll 1. \tag{24.24}$$

Compte tenu de (24.24), posons ch $(k_3 b) \cong 1$ et sh $(k_3 b) \cong k_3 b$ et en plus (conformément à 24.23) que

$$(k_3^2 - k_2^2)/2k_2k_3 \approx k_3/2k_2 \approx \frac{1}{2}\sqrt{U_0/E}.$$

En définitive la relation (24.21) devient

$$\cos(pa/\hbar) = F(k_2 a), \tag{24.25}$$

où l'on utilise la notation

$$F(y) = \cos y + (mU_0 b/k_2\hbar^2)\sin y. \tag{24.26}$$

La condition (24.22) se laisse mettre sous la forme

$$-1 \leqslant F(k_2 a) \leqslant 1. \tag{24.27}$$

La fonction $F(k_2 a)$ est représentée fig. 24.3. Les secteurs disposés le long de l'axe $k_2 a$ pour lesquels la condition (24.27) se trouve satis-

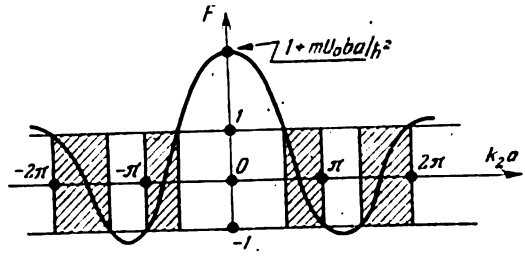


Fig. 24.3.

faite sont hachurés ; à ces secteurs correspondent les bandes d'énergies permises (on notera que $k_2 = \sqrt{2mE}/\hbar$).

Les formules (24.25)-(24.27) appellent les remarques suivantes. 1°. Si $a \to \infty$ (passage au cas de l'électron libre), $\cos(k_2 a) \to \cos(pa/\hbar)$, ce qui correspond au passage à la formule classique (23.16) déterminant l'énergie et l'impulsion de la particule. 2°. Il ressort de la fig. 24.3 que les discontinuités de l'énergie de l'électron ont lieu lorsque $\cos(pa/\hbar) = \pm 1$, donc pour $pa/\hbar = n\pi$, n étant des nombres entiers. Selon (24.11) cela signifie que les discontinuités de l'énergie ont lieu aux frontières des zones de Brillouin.

La fig. 24.4. représente la dépendance de l'énergie de l'électron avec son impulsion exprimée par la relation (24.25). On y discerne bien les discontinuités de l'énergie (à gauche les bandes correspondantes sont représentées par des régions hachurées). A titre de comparaison on a superposé en pointillé la dépendance classique de l'énergie avec l'impulsion pour un électron libre : $E = p^2/2m$.

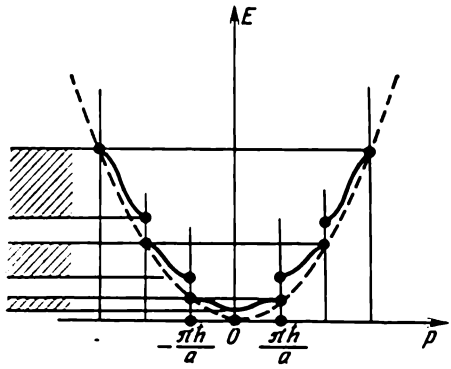


Fig. 24.4.

Formation des bandes d'énergie traitée comme l'effet de la levée de la dégénérescence commutative. La transformation des niveaux d'énergie d'un électron lié à un atome en des bandes d'énergie pour les électrons « collectivisés » par le cristal peut être considérée comme le résultat de la levée de la dégénérescence commutative.

Nous avons mentionné au § 22 que dans le cas général d'un potentiel non coulombien l'énergie que possède un électron dans un atome est déterminée par les nombres quantiques n et l, ce qui permet de dire que cette énergie est dégénérée $2(2l + 1)$ fois. En supposant qu'un atome faisant partie d'un collectif parfaitement ordonné de N atomes identiques reste isolé de ses voisins, on doit en conclure que l'énergie de l'électron y est dégénérée $2N(2l + 1)$ fois. L'apparition du facteur N résulte de ce qu'on appelle la *dégénérescence commutative* : dans un collectif ordonné il n'y a pas d'atomes physiquement distincts, aussi l'énergie de l'électron ne peut-elle dépendre de ce auprès duquel des N atomes se trouve cet électron. Cependant dans un collectif réel (on doit entendre par là un cristal) les atomes ne sont pas isolés les uns des autres, puisqu'il y existe des interactions mutuelles. Ces interactions donnent lieu à la « collectivisation » de l'électron et à une levée partielle de la dégénérescence de ses niveaux : ainsi un niveau dégénéré $2N(2l + 1)$ fois éclate en formant un système de $N(2l + 1)$ sous-niveaux, dont chacun reste dégénéré deux fois (par rapport au nombre de spin σ). Aussi la « collectivisation » de l'électron par le cristal lève-t-elle la dégénérescence commutative et la dégénérescence par rapport au nombre m.

Il est essentiel de noter que le système de $N(2l + 1)$ sous-niveaux n'est pas discret mais forme une bande de valeurs permises de l'énergie de l'électron. En effet, soit ΔE la largeur du système de sous-niveaux, et $\Delta\varepsilon$ la distance de séparation de ces sous-niveaux : $\Delta\varepsilon =$

$= \Delta E/N\,(2l+1)$. Pour que le système de sous-niveaux soit discret, il faut que $\Delta\varepsilon > \hbar/\tau$, τ étant le temps de vie de l'électron dans le cristal ; autrement dit, la distance de séparation des sous-niveaux doit être plus grande que son énergie, qui est donnée par la relation d'incertitude (3.2). Cela signifie que doit être remplie la condition :

$$\hbar\,(2l+1)\,N/\Delta E < \tau. \tag{24.28}$$

En posant $N\,(2l+1) \approx 10^{23}$ et $\Delta E \approx 1$ eV, on trouve que τ doit être plus grand que 10^8 s, soit supérieur à 10 ans. Or, comme le temps de vie d'un électron collectivisé par le cristal est toujours plus court, la relation (24.28) ne peut être satisfaite. C'est ce qui permet de considérer le système de $N\,(2l+1)$ sous-niveaux comme une bande d'énergie. Il est clair que le nombre d'états électroniques reste fini dans la bande, cette dernière ne pouvant assimiler plus de $2N\,(2l+1)$ électrons. C'est ce qui permet de parler du degré d'occupation de la bande, de bandes complètement occupées, etc.

§ 25. Probabilités des transitions quantiques

Les transitions quantiques et le principe de superposition des états. Supposons que sous l'action d'un facteur extérieur la microparticule effectue une transition d'un état stationnaire à un autre. Comment fait-on pour calculer la probabilité de cette transition ?

Les états initial et final de la microparticule sont décrits par des fonctions telles que (20.16) ; pour l'état initial se sera par exemple $\Psi_n(x, t) = \varphi_n(x)\exp(-iE_nt/\hbar)$. On a désigné ici par x l'ensemble des coordonnées spatiales. La fonction Ψ_n satisfait à l'équation de Schrödinger (20.17) :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_n = \hat{H}\Psi_n \tag{25.1}$$

(nous l'appellerons équation « non perturbée »). La nature physique du facteur extérieur déterminant la transition peut être quelconque. Par exemple, ce peut être l'interaction de la microparticule avec un rayonnement électromagnétique. Dans l'appareil de la mécanique quantique ces facteurs jouent le rôle d'un certain potentiel d'interaction qu'on doit ajouter au hamiltonien non perturbé $\hat{H}$. Au § 22, en considérant l'interaction de l'électron avec un rayonnement, nous avons interprété ce terme additif comme une perturbation et nous l'avons désigné par $\hat{H}'$. Nous maintiendrons ici ce même symbole. Compte tenu de la perturbation $\hat{H}'$, nous écrirons l'équation de Schrödinger comme suit

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Phi_n = (\hat{H} + \hat{H}')\,\Phi_n. \tag{25.2}$$

C'est l'équation de Schrödinger dite « perturbée ». Ses solutions Φ_n ne représentent plus des états stationnaires, de sorte que l'indice n ne concerne plus les niveaux d'énergie, mais sert uniquement à préciser les antécédents : un état perturbé donné provient du n-ième état non perturbé.

Il est fort important que l'état Φ_n est un état de *superposition* défini par

$$\Phi_n(x, t) = \sum_k \chi_{nk}(t)\, \Psi_k(x,t). \tag{25.3}$$

Si à un instant t on déclenche un *détecteur* approprié, la superposition (25.3) sera détruite et on détectera la microparticule dans un de ses états stationnaires, l'état Ψ_m par exemple. C'est ce qui indique qu'une transition de l'état Ψ_n à l'état Ψ_m s'était produite. Nous savons que la probabilité d'une telle transition est donnée par $|\chi_{nm}(t)|^2$.

Le lecteur connaît déjà tout cela, puisque tout ce que nous venons de dire ne fait que reprendre les remarques que nous avons faites au § 10 à propos de la relation (10.3), qui est en fait équivalente à la relation (25.3).

Ainsi, comme on pouvait s'y attendre, la probabilité de transition est égale au carré du module de l'amplitude de transition

$$w_{nm} = |\chi_{nm}(t)|^2. \tag{25.4}$$

Cette amplitude est un des coefficients figurant dans la superposition (25.3), qui représente le développement de l'état perturbé Φ_n suivant les états non perturbés.

Passage à la représentation en énergie. Afin de calculer la probabilité w_{nm} on doit tout d'abord résoudre l'équation (25.2) et ensuite déterminer les coefficients du développement des solutions obtenues suivant les états qui sont de la forme (20.16). On voit qu'il s'agit ici du premier procédé qui a été cité à propos du « schéma » de passage d'un mode de représentation à un autre (cf. § 23). Cependant il est préférable d'utiliser le second procédé indiqué dans le « schéma » et c'est la mise en œuvre de ce procédé-là que nous considérons ci-dessous.

Conformément à (15.5) les coefficients χ_{nk} de la superposition (25.3) peuvent être considérés comme une fonction d'onde décrivant l'état perturbé, mais dans une représentation autre que la représentation en coordonnées (dans cette dernière représentation cette tâche est assumée par la fonction Φ_n). Cette autre représentation se rapporte à l'une des grandeurs physiques de l'ensemble, pour laquelle les fonctions Ψ_k jouent le rôle de fonctions propres. Comme les fonctions Ψ_k sont les fonctions propres du hamiltonien, nous dirons que nous avons affaire à une *représentation en énergie*. En suivant la voie tracée par le second procédé de notre « schéma » du § 23, nous devons transformer l'équation perturbée (25.2) qui nous est donnée dans la

représentation en coordonnées, de manière qu'elle nous soit donnée dans la représentation en énergie ; ce sera une nouvelle forme de l'équation perturbée de Schrödinger, dont les solutions représenteront les amplitudes de transition que nous voulons déterminer.

Nous commençons par porter (25.3) dans (25.2) et en tenant compte de (25.1) nous obtenons

$$i\hbar \sum_k \frac{d\chi_{nk}}{dt} \Psi_k = \sum_k \chi_{nk} \hat{H}'(t) \Psi_k. \tag{25.5}$$

Multiplions les deux membres de (25.5) par Ψ_m^* et intégrons par rapport aux coordonnées spatiales :

$$i\hbar \sum_k \frac{d\chi_{nk}}{dt} \int \Psi_m^* \Psi_k \, dx = \sum_k \chi_{nk} \int \Psi_m^* \hat{H}'(t) \Psi_k \, dx.$$

Compte tenu du caractère orthonormé des états stationnaires, on peut mettre l'équation précédente sous la forme

$$i\hbar \frac{d\chi_{nm}}{dt} = \sum_k \chi_{nk} \int \Psi_m^* \hat{H}' \Psi_k \, dx. \tag{25.6}$$

Nous avons par ailleurs

$$\int \Psi_m^* \hat{H}' \Psi_k \, dx = \exp(i\omega_{mk} t) \int \varphi_m^* \hat{H}' \varphi_k \, dx =$$

$$= \exp(i\omega_{mk} t) \langle m | \hat{H}' | k \rangle, \tag{25.7}$$

où

$$\omega_{mk} = (E_m - E_k)/\hbar. \tag{25.8}$$

Avec (25.7) l'équation (25.6) prend sa forme définitive

$$\frac{d}{dt} \chi_{nm} = -\frac{i}{\hbar} \sum_k \chi_{nk} \langle m | \hat{H}'(t) | k \rangle \exp(i\omega_{mk} t). \tag{25.9}$$

C'est l'équation « perturbée » de Schrödinger dans la représentation en énergie. En fait ce n'est pas une équation mais tout un système d'équations. Nous noterons que le système (25.9) est d'un emploi plus commode que l'équation (25.2) en ce que sa résolution nous fournit directement les amplitudes de transition χ_{nm}. Il est également fort important que la résolution du système (25.9) se base sur la mise en œuvre de la méthode de perturbation.

Application de la méthode de perturbation au calcul des probabilités de transition. En règle générale, la perturbation est suffisamment faible pour pouvoir appliquer la *méthode de perturbation* à la résolution approchée du système (25.9). La petitesse de la perturbation signifie que la fonction Φ_n peut être représentée par

$$\Phi_n = \Psi_n + \Lambda_n, \tag{25.10}$$

où Λ_n est un petit terme additif à la fonction Ψ_n. D'après (25.10) nous écrivons

$$\chi_{nk} = \delta_{nk} + \chi_{nk}^{(1)} + \chi_{nk}^{(2)} + \chi_{nk}^{(3)} + \cdots \tag{25.11}$$

Il est facile de voir que $\Lambda = \sum_k [\chi_{nk}^{(1)} + \chi_{nk}^{(2)} + \chi_{nk}^{(3)} + \ldots] \Psi_k$. D'après (25.11) le petit terme additif Λ se laisse subdiviser en plusieurs termes additifs de différents ordres de petitesse; les $\chi_{nk}^{(1)}$ sont du même ordre de grandeur que la perturbation, les $\chi_{nk}^{(2)}$ sont du deuxième ordre par rapport à la perturbation, etc. En portant (25.11) dans (25.9) on obtient

$$\frac{d}{dt}\chi_{nm}^{(1)} + \frac{d}{dt}\chi_{nm}^{(2)} + \frac{d}{dt}\chi_{nm}^{(3)} + \cdots =$$

$$= -\frac{i}{h}\sum_k (\delta_{nk} + \chi_{nk}^{(1)} + \chi_{nk}^{(2)} + \ldots)\langle m|\hat{H}'|k\rangle \exp(i\omega_{mk}t). \tag{25.12}$$

Récrivons (25.12) en n'y conservant que les termes du premier ordre de petitesse par rapport à la perturbation:

$$\frac{d}{dt}\chi_{nm}^{(1)} = -\frac{i}{h}\langle m|\hat{H}'|n\rangle \exp(i\omega_{mn}t). \tag{25.13}$$

Nous avons obtenu ainsi une expression approchée des amplitudes χ_{nm} correspondant à la *première approximation de la méthode de perturbation.*

S'il s'avère que $\langle m \mid \hat{H}' \mid n\rangle = 0$, on devra utiliser pour les amplitudes une formule correspondant à la *deuxième approximation* de la méthode de perturbation. Cette nouvelle approximation se déduit de (25.12) en y maintenant les termes du second ordre de petitesse

$$\frac{d}{dt}\chi_{nm}^{(2)} = -\frac{i}{h}\sum_k \chi_{nm}^{(1)}\langle m|\hat{H}'|k\rangle \exp(i\omega_{mk}t). \tag{25.14}$$

De même, la *troisième approximation* de la méthode de perturbation conduit au résultat suivant

$$\frac{d}{dt}\chi_{nm}^{(3)} = -\frac{i}{h}\sum_k \chi_{nk}^{(2)}\langle m|\hat{H}'|k\rangle \exp(i\omega_{mk}t). \tag{25.15}$$

Connaissant dans n'importe quel ordre d'approximation de la méthode de perturbation les amplitudes de transition on peut calculer avec ce même ordre d'approximation les probabilités de transition. Dans la première approximation on a d'après (25.13)

$$w_{nm}^{(1)} = |\chi_{nm}^{(1)}(t)|^2 = \frac{1}{h^2}\left|\int_{-\infty}^{t}\langle m|\hat{H}'(t)|n\rangle \exp(i\omega_{mn}t)\,dt\right|^2. \tag{25.16}$$

Dans la deuxième approximation, d'après (25.14) on a

$$w_{nm}^{(2)} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \sum_k \int_{-\infty}^{t} \chi_{nk}^{(1)}(t) \langle m | \hat{H}'(t) | k \rangle \exp(i\omega_{mk} t)\, dt \right|^2 \tag{25.17}$$

et ainsi de suite.

On notera que le résultat (25.17) caractérise une interférence des amplitudes. L'amplitude de transition résultante est alors égale à la somme des amplitudes des transitions s'effectuant par différents états intermédiaires. Le fait qu'il soit impossible de déceler la présence de la microparticule dans n'importe quel état intermédiaire détermine l'indiscernabilité des alternatives et oblige de traiter les états intermédiaires comme des états virtuels.

Les calculs ultérieurs comportent la substitution dans les formules (25.16) et (25.17) de la forme concrète des opérateurs $\hat{H}'$. En électronique quantique, par exemple, on utilise l'opérateur (22.29). L'étude de ces problèmes dépasse cependant le cadre de ce livre, et nous renvoyons le lecteur à des ouvrages tels que [12, 41].

Les diagrammes de Feynman et le calcul des probabilités de transition. En conclusion de ce paragraphe nous reprendrons les diagrammes de Feynman que nous avons définis au § 6 (voir le diagramme de la fig. 6.1) concernant la diffusion mutuelle de deux électrons). On notera que tous les diagrammes représentés fig. 6.1 concernaient une seule et même transition quantique — la transition de deux électrons d'états initiaux bien déterminés dans des états finals également bien déterminés. En toute rigueur, toute transition concrète doit être décrite par un nombre infini de diagrammes, comportant un nombre de plus en plus grand de sommets. Rappelons à ce propos ce que nous avons dit au § 6 : « Pour pouvoir calculer la probabilité de la diffusion mutuelle de deux électrons, on doit en principe tenir compte de la contribution [à cette transition] de différents processus décrits par des diagrammes différents. »

En revenant aux diagrammes de Feynman, nous sommes maintenant en mesure de préciser le sens de cette proposition. En effet à chaque diagramme correspond une certaine amplitude de transition ; l'amplitude résultante est égale à la somme de ces différentes amplitudes. Par conséquent, pour calculer la probabilité d'une transition quantique donnée on doit, *premièrement*, élaborer tous les diagrammes de Feynman imaginables et enregistrer les amplitudes correspondant à tous ces diagrammes, et *deuxièmement*, additionner toutes ces amplitudes et prendre le carré du module de la somme des amplitudes.

Nous avons écrit au § 6 : « Heureusement les contributions des différents processus (donc des différents diagrammes) sont inégales » ; cela signifie qu'en pratique on utilise la méthode de perturbation, qui permet de n'utiliser dans la sommation des amplitudes que les

premiers termes. La quantité sans dimension $(e^2/\hbar c)^{n/2}$ que nous avons mentionnée au § 6 est le facteur qui fait figurer dans la somme des amplitudes dont il a été question les amplitudes correspondant aux diagrammes comportant n sommets. C'est la petitesse de cette quantité qui rend possible la mise en œuvre de la méthode de perturbation dans l'électrodynamique quantique.

On peut dire que la notion quanto-mécanique de l'interférence des amplitudes de transition, combinée à la méthode de perturbation, constitue la base de l'électrodynamique quantique en tant que théorie quantique.

§ 26. Procédés utilisés pour décrire l'évolution dans le temps des microsystèmes

Dans ce dernier paragraphe nous traiterons d'une manière tout à fait générale l'importante question de la description de microsystèmes évoluant dans le temps. L'appareil de la mécanique quantique que nous possédons aujourd'hui permet d'utiliser pour cela trois procédés différents. Chacun de ces procédés conduit à une forme particulière d'écriture en mécanique quantique de l'équation de mouvement.

On dit généralement que ces trois procédés de description sont basés sur trois représentations différentes : la *représentation de Schrödinger*, la *représentation de Heisenberg* et la *représentation d'interaction* (ou *de Dirac*). Le terme « représentation » est utilisé dans un sens plus large et donc distinct du sens que nous lui avons attribué jusqu'à présent. On peut fort bien parler d'une représentation de Schrödinger en coordonnées ou en impulsion. Dans ce qui précède nous n'avons utilisé que la représentation de Schrödinger donnée sous la forme de représentations en coordonnées, en impulsion, en énergie. Dans ce qui suit nous définirons les représentations de Schrödinger, de Heisenberg et de Dirac dans le cas où elles sont données « en coordonnées ».

La représentation de Schrödinger. Dans cette représentation l'évolution du microsystème dans le temps est décrite par l'évolution dans le temps de ses amplitudes d'états :

$$\psi(x, t) = \hat{U}(t, t_0)\,\psi(x, t_0). \tag{26.1}$$

L'opérateur $\hat{U}(t, t_0)$ satisfait aux conditions suivantes :

$$\hat{U}(t_0, t_0) = 1 \tag{26.2}$$

$$\hat{U}\hat{U}^+ = \hat{U}^+\hat{U} = 1. \tag{26.3}$$

La condition (26.2) est évidente. La condition unitaire (26.3) résulte directement de ce que la normation des amplitudes des états est indé-

pendante du choix du temps:

$$\int \psi^*(x, t)\psi(x, t)\,dx = \int \psi^*(x, t_0)\psi(x, t_0)\,dx.$$

L'équation de mouvement quanto-mécanique se présente dans la représentation de Schrödinger sous la forme suivante (adaptée à la forme de l'équation de Schrödinger):

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t) = \hat{H}(x)\psi(x, t), \tag{26.4}$$

l'opérateur $\hat{H}$ y est indépendant du temps. A l'aide de (26.4) et de (26.2) on trouve sans difficulté la forme de l'opérateur $\hat{U}(t, t_0)$:

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}(x)\right]. \tag{26.5}$$

L'exponentielle doit être interprétée comme représentant un développement en série de puissances.

La représentation de Heisenberg. Dans cette représentation l'évolution du microsystème dans le temps est décrite par l'*évolution des opérateurs hermitiens*, caractérisant le microsystème considéré. On suppose que les amplitudes des états sont, elles, indépendantes du temps:

$$\varphi(x, t) = \varphi(x, t_0). \tag{26.6}$$

Il s'ensuit de (26.1) que pour passer de la forme des amplitudes dans la représentation de Schrödinger à celle de la représentation de Heisenberg on doit faire appel à l'opérateur $\hat{U}^+(t, t_0)$:

$$\varphi(x, t) = \hat{U}^+(t, t_0)\psi(x, t_0). \tag{26.7}$$

En effet si l'on porte (26.1) dans (26.7) on obtient

$$\varphi(x, t) = \hat{U}^+\hat{U}\psi(x, t_0) = \psi(x, t_0) = \hat{U}(t_0, t_0)\varphi(x, t_0) = \varphi(x, t_0).$$

Soit $\hat{L}(x)$ l'opérateur d'une grandeur physique donné dans la représentation de Schrödinger. D'après (17.32) et (26.7) dans la représentation de Heisenberg ce même opérateur se présentera sous la forme suivante

$$\hat{L}(x, t) = \hat{U}^+(t, t_0)\hat{L}(x)\hat{U}(t, t_0). \tag{26.8}$$

En portant dans (26.8) nous obtenons

$$\hat{L}(x, t) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}(x)\right]\hat{L}(x)\times$$
$$\times\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}(x)\right]. \tag{26.9}$$

En différentiant (26.9) par rapport au temps on trouve

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{L}(x, t) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}(x)\right]\hat{L}(x)\hat{H}(x) \times$$
$$\times \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}(x)\right] - \exp\left[\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}(x)\right] \times$$
$$\times \hat{H}(x)\hat{L}(x)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}(x)\right], \qquad (26.10)$$

ce qu'on peut écrire sous la forme

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{L}(x, t) = \hat{U}^+\hat{L}(x)\hat{H}(x)\hat{U} - \hat{U}^+\hat{H}(x)\hat{L}(x)\hat{U} \qquad (26.11)$$

ou encore, en tenant compte de (26.3), sous la forme

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{L}(x, t) = \hat{U}^+\hat{L}(x)\hat{U}\hat{U}^+\hat{H}(x)\hat{U} - \hat{U}^+\hat{H}(x)\hat{U}\hat{U}^+\hat{L}(x)\hat{U}. \qquad (26.12)$$

En appliquant (26.8) aussi bien à l'opérateur $\hat{L}(x)$ qu'à l'opérateur $\hat{H}(x)$, on arrive à l'équation de mouvement dans la représentation de Heisenberg [comparez à (19.10)]

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{L}(x, t) = [\hat{L}(x, t)], \hat{H}(x, t)]. \qquad (26.13)$$

Comparaison des représentations de Schrödinger et de Heisenberg. Notons qu'à l'instant t_0 on a $\varphi(x, t_0) = \psi(x, t_0)$ et $\hat{L}(x, t_0) = \hat{L}(x)$; cela montre qu'aussi bien les amplitudes des états que les opérateurs sont les mêmes dans les deux représentations. Cependant aux instants ultérieurs on arrive à discerner des comportements différents: dans la représentation de Schrödinger c'est l'amplitude de l'état qui change, l'opérateur restant identique à ce qu'il était à l'instant t_0; au contraire, dans la représentation de Heisenberg c'est l'opérateur qui change, l'amplitude de l'état restant la même qu'à l'instant t_0. On dit que dans la représentation de Schrödinger la dépendance avec le temps affecte les amplitudes des états, et dans celle de Heisenberg ce sont les opérateurs qui en sont affectés.

Pour effectuer des calculs pratiques il est généralement plus commode d'utiliser la représentation de Schrödinger. Néanmoins la représentation de Heisenberg offre l'avantage de pouvoir dégager l'analogie mathématique entre la mécanique quantique et la mécanique classique. C'est justement dans la représentation de Heisenberg que les relations quanto-mécaniques se présentent sous la forme de relations classiques, les grandeurs physiques y étant remplacées par les opérateurs convenables (revoir à ce sujet la fin du § 20).

Lorsque Schrödinger suggéra en 1926 la représentation qui porte son nom, il assimilait les amplitudes des états dépendant du temps à des ondes et de ce fait jeta les fondements de ce qui devint plus tard la « mécanique ondulatoire ». En 1925 Heisenberg avança son

procédé de description de l'évolution des microsystèmes dans le temps; initialement l'équation (26.13) a été donnée sous forme de matrice. De ce fait il fut à l'origine d'une voie d'étude qui reçut le nom de « mécanique matricielle ». La distinction entre ces deux voies se ramène à la différence qui existe entre les représentations de Schrödinger et de Heisenberg, ce qui signifie que cette distinction est toute formelle, déterminée par l'appareil mathématique utilisé.

La représentation d'interaction (représentation de Dirac). Supposons que le hamiltonien du microsystème se scinde en deux termes, dont l'un ($\hat{H}_0$) représente le hamiltonien proprement dit du système, et l'autre ($\hat{H}_1$) caractérise l'interaction du microsystème initial avec des champs extérieurs ou d'autres systèmes (il représente donc l'effet de perturbation auquel est soumis le microsystème initial):

$$\hat{H}(x, t) = \hat{H}_0(x) + \hat{H}_1(x, t). \tag{26.14}$$

Dans ces conditions il est commode de mettre en œuvre la *représentation d'interaction*, introduite par Dirac.

Dans la représentation d'interaction l'amplitude de l'état $\Psi(x, t)$ s'exprime en fonction de l'amplitude de l'état $\psi(x, t)$ donnée dans la représentation de Schrödinger:

$$\Psi(x, t) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(x)(t-t_0)\right]\psi(x, t). \tag{26.15}$$

Conformément à (17.32) on en tire la forme de l'opérateur $\hat{L}_B(x, t)$ dans la représentation d'interaction:

$$\hat{L}_B(x, t) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}_0(x)\right]\hat{L}(x) \times$$
$$\times \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}_0(x)\right]. \tag{26.16}$$

On remarquera que dans (26.15) et (26.16) figure non pas la totalité du hamiltonien $\hat{H}(x, t)$, mais seulement sa partie non perturbée $\hat{H}_0(x)$.

Différentions (26.15) par rapport au temps:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x, t) = -\hat{H}_0(x)\Psi(x, t) +$$
$$+ i\hbar\exp\left[\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}_0(x)\right]\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t).$$

Comme

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t) = [\hat{H}_0(x) + \hat{H}_1(x, t)]\psi(x, t),$$

l'expression ci-dessus s'écrit

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}_0(x)\right]\hat{H}_1(x, t)\psi(x, t) =$$
$$= \exp\left[\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}_0(x)\right]\hat{H}_1 \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}_0(x)\right] \times$$
$$\times \Psi(x, t) = \hat{H}_1^B(x, t)\Psi(x, t). \quad (26.17)$$

En rassemblant ces différents résultats on arrive aux équations de mouvement dans la représentation d'interaction:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\hat{L}_B(x, t) = [\hat{L}_B(x, t), \hat{H}_0(x, t)], \quad (26.18)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(x, t) = \hat{H}_1^B(x, t)\Psi(x, t) \quad (26.19)$$

[on notera que (26.18) résulte d'une différentiation par rapport au temps de (26.16)].

Nous voyons ainsi que dans la représentation d'interaction la dépendance avec le temps de l'amplitude de l'état est déterminée par le hamiltonien d'interaction (de perturbation) $\hat{H}_1^B$, tandis que la dépendance avec le temps de l'opérateur est déterminée par la partie non perturbée ($\hat{H}_0$) du hamiltonien. La représentation d'interaction occupe donc de ce point de vue une position intermédiaire entre les représentations de Schrödinger et de Heisenberg.

Retour sur l'analogie vectorielle. L'analogie vectorielle permet de visualiser les différences entre les trois représentations dont il a été question ci-dessus. Faisons correspondre au système des états de base de la microparticule un système de vecteurs de base mutuellement orthogonaux dans un certain espace conventionnel. Nous exprimerons tous les opérateurs sous une forme matricielle, dépendant du choix du système de vecteurs de base. Les états de la microparticule sont décrits par des vecteurs rapportés à un système de coordonnées défini par les vecteurs de base. On a donc un système de vecteurs de base et un ensemble de vecteurs-états rapporté à ce système.

Examinons maintenant les différentes représentations. Dans la représentation de Schrödinger l'évolution dans le temps d'une microparticule implique une rotation du vecteur-état par rapport à un système fixe de vecteurs de base. Dans la représentation de Heisenberg l'évolution dans le temps de la microparticule implique au contraire une rotation du système de vecteurs de base par rapport à un vecteur-état fixe. Enfin la représentation d'interaction implique des rotations aussi bien du système des vecteurs de base que du vecteur-état. La rotation du vecteur-état est uniquement déterminée par les interactions de la microparticule avec les champs extérieurs (la perturbation) et présente donc un caractère dynamique. La rotation du système de vecteurs de base n'étant pas liée à des facteurs extérieurs, présente un caractère cinématique.

Une dernière remarque. Les procédés de description de l'évolution dans le temps des microsystèmes, que nous venons de décrire, sont basés sur la mise en œuvre de l'équation de mouvement quanto-mécanique. Leur mise en œuvre présuppose une évolution continue dans le temps soit des amplitudes des états, soit de certains opérateurs hermitiens, soit l'évolution simultanée des amplitudes et des opérateurs. On connaît cependant des processus qui en sont qualitativement différents. Ainsi, par exemple, la destruction des superpositions des états provoquée lors des mesures par la mise en action d'un détecteur donne lieu à un *saut* de l'amplitude de l'état. Il est évident que cette variation d'amplitude ne se conforme à aucune équation de mouvement et ne peut être prévue que de manière aléatoire.

Aussi distingue-t-on en mécanique quantique deux sortes de processus : les processus lors desquels les amplitudes des états varient de façon continue en conformité avec l'équation de mouvement et les processus lors desquels les amplitudes des états varient par saut au cours de mesures; ces dernières variations ne peuvent être univoquement prédéterminées. L'appareil existant de la mécanique quantique est plus particulièrement adapté à l'étude des processus de la *première* sorte. Depuis quelque temps on manifeste beaucoup d'intérêt pour le problème quanto-mécanique des mesures, ce qui implique un important développement des processus de la *deuxième* sorte (voir à ce sujet les remarques concernant le problème des mesures en mécanique quantique dans [42]).

Est largement répandue l'opinion que l'interprétation probabiliste de la mécanique quantique se résume uniquement dans l'introduction des amplitudes de probabilité, puisque ce n'est que là que sont valables les prévisions univoques données par la résolution de l'équation de Schrödinger. Une telle opinion tient à ce que l'on ne prend pas en ligne de compte les processus de la deuxième sorte, dont il a été question ci-dessus. Il est indubitable que l'étude de ces processus rend plus compliqués les aspects probabilistes de la mécanique quantique, puisqu'ils impliquent la nécessité de prendre en considération une espèce de « probabilité seconde », c'est-à-dire la probabilité d'actualisation de l'amplitude de probabilité.

On doit convenir que la théorie des mesures quanto-mécaniques est loin d'être parachevée ; les processus de la seconde sorte n'occupent pas encore la place qui leur revient dans l'appareil de la mécanique quantique. Cela signifie que la mécanique quantique moderne, malgré toute sa rigueur et une beauté mathématique indéniable, recèle en son sein des problèmes non encore résolus, mais qui prédéterminent son développement ultérieur en tant que théorie physique.

NOTES SUR L'HISTOIRE DE LA NAISSANCE ET DU DÉVELOPPEMENT DE LA MÉCANIQUE QUANTIQUE

« *La crise de la physique* ». Le XIXe siècle a été une période de rapide développement des sciences physiques. Il suffit de mentionner les succès remportés dans le domaine de l'électricité et du magnétisme qui ont abouti à la théorie du champ électromagnetique de Maxwell, ce qui a permis d'inclure l'optique dans le cadre des phénomènes électromagnétiques. La mécanique classique a connu, elle aussi des progrès considérables et a pris une forme rigoureuse et parachevée grâce à de brillants travaux mathématiques; nous mentionnerons encore l'énoncé de toute une série de principes physiques universels, parmi lesquels la première place revient à la loi de conservation et de la conversion de l'énergie. Il n'est donc pas étonnant qu'à la fin du XIXe siècle tout le monde était convaincu que la description scientifique des lois de la nature était presque parachevée. Citons à titre d'exemple le témoignage bien connu de M. Planck: « *Lorsque je débutais dans mes recherches physiques* (1880), *j'avais demandé à mon éminent maitre Philipp Jolly de me conseiller en ce qui concernait les conditions et les perspectives de mes recherches*; *il me décrivit la physique comme une science très développée, arrivée presque à maturité, qui, maintenant qu'elle se trouvait pour ainsi dire surmontée par le principe de la conservation de l'énergie, devait bientôt prendre sa forme définitive et par conséquent stable. Bien sûr, dans plusieurs recoins on arrive bien à déceler un grain de poussière ou une bulle qu'il faudrait bien éloigner, mais le système pur dans son ensemble repose fermement sur ses fondements et la physique théorique tend à vue d'œil vers le degré de perfection qui depuis des siècles est celui de la géométrie.* »

En août 1900 le grand mathématicien Hilbert a énoncé au Deuxième Congrès international des Mathématiques ses 23 problèmes. L'un de ces problèmes (le sixième) concernait l'axiomatisation de la physique. Hilbert suggérait qu'il fallait formuler un nombre fini d'axiomes de base, à partir desquels par des raisonnements logiques on pourrait tirer toutes les conséquences requises pour donner une image physique *complète* du monde. Le fait même que fut posé ce problème témoigne de ce que les savants de l'époque étaient persuadés que la science physique pouvait être parachevée dans un proche avenir.

Les événements ultérieurs ont détruit peu après toutes ces illusions. A la frontière des XIXe et XXe siècles, une série de découvertes fondamentales ont été faites qu'on n'arrivait pas à incorporer dans les théories physiques existantes. La liste de ces découvertes était suffisamment longue: les rayons X, la variation de la masse des électrons avec la vitesse, les lois inexpliquables de l'effet photoélectrique, la radioactivité, etc. La nature semblait se moquer de l'assurance des hommes qui s'étaient imaginés avoir surpris tous ses secrets.

Ce tournant inattendu des événements obligea un nombre important de physiciens et de philosophes à affirmer que les bases existantes étaient *en voie d'écroulement*, que la matière était impénétrable, qu'il n'existait pas de lois objectives de la nature, que la masse s'évanouissait, etc. A l'unanimité qui régnait jusqu'alors succéda une atmosphère d'âpres discussions concernant non plus des particularités, mais des idées fondamentales, déterminantes.

Dans son livre « Matérialisme et empiriocriticisme » paru en 1908, V. I. Lénine qualifia cette période de développement de la physique de période de « crise de la physique » dont le fond « *consiste en une démolition des anciennes lois et des principes fondamentaux, en un rejet de la réalité objective hors de la conscience, ce qui revient à remplacer le matérialisme par l'idéalisme et l'agnosticisme. « La matière a disparu », ainsi pourrait-on formuler la principale difficulté qui a provoqué cette crise* » [43]. Analysant les causes qui ont provoqué cette crise, Lénine écrivait: « *La nouvelle physique a déraillé vers l'idéalisme, principalement parce que les physiciens ignoraient la dialectique.* » [43] » Prenant la défense de la position dialectique, Lénine écrivait: « *Disant que la « matière disparait », on doit entendre par là que la limite de nos anciennes connaissances de la matière s'efface et que nos connaissances deviennent plus profondes...* » [43]. Lénine disait qu'à la période de crise succéderait un nouveau saut dans le développement de la physique et que ce développement ultérieur serait guidé par le matérialisme dialectique. Il écrivait à ce sujet: « *La physique moderne est en couches. Elle doit mettre au monde le matérialisme dialectique. L'accouchement est laborieux.* » [43].

Jetant un regard en arrière nous pouvons dire aujourd'hui que l'accouchement s'est produit, et s'est achevé par l'apparition de la mécanique quantique. Comme Lénine l'avait prévu, une fois que la « crise de la physique » a été surmontée, nos connaissances de la matière sont devenues *plus profondes*, ce qui a exigé d'abandonner les conceptions métaphysiques au profit des conceptions dialectiques. Cela s'est manifesté le plus nettement dans la mécanique quantique. Nous sommes bien fondés d'associer à la mécanique quantique un *saut qualitatif* dans la connaissance des lois de la nature (cf. § 16).

En étudiant l'histoire de la période initiale du développement de

la mécanique quantique, on peut définir trois étapes. Une *première étape* s'étendant de la fin du XIXe siècle jusqu'à 1912 (premières expériences et premières tentatives de leur interprétation). Une *deuxième étape* : 1913-1922 (théorie quantique de Bohr). Une *troisième* étape : 1923-1927 (établissement de la mécanique quantique). Nous allons examiner en détail ces trois étapes.

Premières expériences et premières tentatives de leur interprétation (fin du XIXe-1912). Les bases de la mécanique quantique ont été établies par des recherches expérimentales entreprises à la fin du XIXe siècle et au début du XXe siècle dans des domaines physiques différents : spectroscopie des atomes, rayonnement du corps noir, effet photoélectrique, physique du solide, études de la structure atomique.

A la fin du XIXe siècle on disposait d'un grand nombre de données factuelles concernant les *spectres d'émission des atomes*. On s'aperçut que les spectres atomiques comportaient des ensembles ordonnés de raies discrètes (des séries). En 1885 Balmer a découvert une série de raies de l'hydrogène atomique, connue sous le nom de série de Balmer, qui se laisse décrire par une formule assez simple. En 1889 Rydberg a mis en évidence une série de raies pour le thallium et le mercure. Des recherches approfondies sur les spectres atomiques ont été entreprises par Kayser et Runge qui avaient utilisé la méthode d'enregistrement photographique. En 1904 Lyman a découvert une série de raies de l'hydrogène atomique dans la partie ultraviolette du spectre, et en 1909 Paschen a découvert une série de raies dans la région de l'infrarouge. Il est remarquable que les séries de Lyman et de Paschen se laissaient décrire par des formules ressemblant fort à celle de la série de Balmer. Ayant remarqué des régularités de structure dans les différentes séries de l'atome, Ritz formula en 1908 son célèbre *principe de combinaison* (voir § 2). Cependant jusqu'à 1913 on n'arrivait pas à interpréter ce principe et la nature des raies spectrales demeurait incomprise.

En 1896 Wien à la suite d'une étude du *rayonnement du corps noir*, établit une formule qui décrivait convenablement les résultats expérimentaux aux grandes fréquences de rayonnement (*loi de Wien*). Cependant cette formule n'était pas satisfaisante aux fréquences basses. En 1900 Rayleigh avança une formule qui cadrait bien avec les résultats de mesure des basses fréquences (*loi de Rayleigh-Jeans*), mais qui conduisait à des résultats absurdes pour les fréquences élevées (cet état de choses a été baptisé « catastrophe de l'ultraviolet »). Au cours de cette même année Pringsheim et Lummer ont entrepris une étude expérimentale étendue à une large gamme de fréquences. Pour interpréter les données expérimentales de ces chercheurs, Planck avança sa fameuse formule empirique qui, dans les gammes de fréquences correspondantes, se réduisait soit à la formule de Wien, soit à celle de Rayleigh-Jeans.

Dans la formule de Planck figurait une constante qu'il dénomma *quantum d'action élémentaire* (il s'agit de la constante de Planck $\hbar$). Planck lui-même exprimait le point de vue suivant (cf. [44]) : « *Ou bien le quantum d'action ne serait qu'une quantité fictive et alors tous les raisonnements ayant conduit à cette loi étaient, eux aussi, illusoires et ne représentaient qu'une manipulation de formules dénuée de sens, ou bien à la base de cette loi se trouvait une idée physique juste, et alors le quantum d'action devait jouer en physique un rôle fondamental ; dans ce dernier cas l'introduction du quantum d'action annonçait l'apparition de quelque chose de tellement nouveau et inouï qu'il semblait nécessaire de refondre les bases mêmes des conceptions de la physique, qui depuis que Newton et Leibnitz ont élaboré l'analyse des quantités infiniment petites, partaient de l'hypothèse de la continuité de toutes les relations de causalité.* » Réfléchissant à la signification de sa formule, Planck en tira une conclusion proprement géniale : il faut admettre que chaque atome d'un corps rayonnant ne peut émettre l'énergie que par *portions* (*quanta*), donc *de manière discontinue*, l'énergie d'un quantum étant égale à $\hbar\omega$. C'est alors que fut publié le mémoire historique de Planck intitulé « Théorie de la loi de répartition de l'énergie dans un spectre normal », qui fut présenté le 14 décembre 1900 à l'Académie des Sciences de Berlin. En un certain sens, cette date peut être considérée comme celle de la naissance de la mécanique quantique.

La découverte de Planck était en flagrante contradiction avec la théorie classique. On doit noter que ce fait jetait le trouble dans l'esprit de Planck lui-même. Cherchant à concilier sa découverte avec les conceptions classiques, il avança en 1911 une étrange conception hybride, selon laquelle n'était discontinu que le processus d'*émission*, la *propagation* et l'*absorption* du rayonnement étant continus.

Cette hypothèse hybride n'a pas été retenue. Dès 1905, Einstein avait donné une brillante interprétation de toutes les particularités connues de l'*effet photoélectrique*, en partant de l'hypothèse que la lumière était non seulement émise, mais également absorbée par portions. Plus tard (en 1917) Einstein arriva à conclure que le quantum de lumière possède non seulement une *énergie* déterminée, mais également une *impulsion* déterminée, égale à $h\omega/c$.

En 1907 Einstein appliqua avec grand succès l'idée de la quantification à la résolution de l'un des problèmes les plus importants de la physique du solide, qui depuis longtemps passionnait les savants. Déjà au XIXe siècle les physiciens avaient constaté que la loi classique de Dulong et Petit était en défaut : la capacité thermique des corps solides n'était pas constante et diminuait lorsqu'on abaissait suffisamment leur température. Citons à titre d'exemple les expériences de Weber (1875) qui observa une dépendance avec la température de la capacité thermique du bore, du carbone et du silicium. On n'arrivait pas à expliquer dans le cadre de la physique classique

la *variation en fonction de la température de la capacité thermique des corps solides*. En 1907 Einstein publia un mémoire intitulé « Théorie du rayonnement de Planck et théorie de la chaleur spécifique ». Appliquant l'idée de la quantification de l'énergie de Planck aux oscillations des atomes dans un cristal, Einstein établit une formule qui, en accord avec les résultats expérimentaux, décrivait la variation thermique de la chaleur spécifique des corps solides. Ce mémoire d'Einstein marqua les débuts de la théorie moderne de la chaleur spécifique des solides.

Nous devons mentionner encore *les recherches concernant la structure de l'atome*, qui débutèrent en 1901 lorsque Thomson suggéra un modèle de l'atome se présentant sous la forme d'une charge positive sphérique portant en son centre un électron. Plus tard, Thomson arriva à la conclusion que le nombre d'électrons contenus dans un atome devait être proportionnel au poids atomique et que l'atome ne pouvait être stable qu'à la condition que les électrons y soient en mouvement.

En 1908 Geiger et Marsden se sont attachés à l'étude de la diffusion des particules α lors de leur passage à travers de minces feuilles de différents métaux. Ils observèrent que la majorité des particules α traversaient ces feuilles sans subir de diffusion, mais que certaines particules, environ une sur dix milles, subissaient une forte déviation (d'un angle supérieur à 90°). En 1911 Rutherford arriva à la conclusion que les rares cas de forte déviation des particules α résultaient non pas de plusieurs actes de collision avec les atomes, mais d'une seule collision ; par suite, au centre de l'atome devait se trouver un petit noyau portant une charge positive, et contenant la presque totalité de la masse de l'atome. Ce fut un pas décisif vers l'élaboration du *modèle planétaire de l'atome*, qui a été définitivement décrit par Rutherford vers 1913.

Nous voyons donc que depuis la fin du XIXe siècle jusqu'en 1913 on a accumulé de nombreuses données expérimentales fort importantes et qu'on n'arrivait pas à interpréter dans le cadre de la théorie existante ; ces nouveaux résultats concernaient la découverte de séries ordonnées de raies dans les spectres atomiques, la découverte de la quantification de l'énergie dans le processus d'émission du rayonnement du corps noir, l'effet photoélectrique et les anomalies de la chaleur spécifique des corps solides, l'élaboration du modèle planétaire de l'atome. Cependant jusqu'en 1913 ces différentes découvertes étaient étudiées indépendamment les unes des autres. Il fallut tout le génie de Bohr pour déceler l'existence d'un fond commun dans tous ces faits expérimentaux et pour élaborer sur cette base une théorie quantique suffisamment conséquente de l'atome.

La théorie quantique de Bohr (1913-1922). C'est en 1913 que parut le mémoire bien connu de Bohr « Sur la structure des atomes et des molécules », consacré à l'étude du modèle planétaire de l'atome d'hydrogène, basée sur l'idée de la quantification (aussi bien l'é-

nergie que le moment cinétique y étaient quantifiés). Rompant avec les conceptions admises, la théorie de Bohr rejetait l'existence d'une corrélation directe entre la fréquence du rayonnement émis par l'atome avec la fréquence circulaire de l'électron dans l'atome. On sait qu'après avoir pris connaissance de cette publication, Einstein s'est exclamé : « *Mais alors la fréquence de la lumière ne dépend absolument pas de la fréquence de l'électron! C'est une découverte sensationnelle!* » En effet, la règle des fréquences proposée par Bohr donnait une explication satisfaisante du principe de combinaison de Ritz et permettait de calculer la constante de Rydberg. Plus tard (en 1949) Einstein écrivait à propos de la théorie de Bohr [45] : « *J'ai toujours considéré comme un miracle qu'une base aussi chancelante et pleine de contradictions ait suffi à Bohr, homme doué d'une intuition géniale, pour découvrir les principales lois des raies spectrales et des couches électroniques des atomes, avec toute la valeur que cela représente pour la chimie. Aujourd'hui encore je considère cet événement comme un miracle. J'estime que c'est un signe d'une extrême musicalité dans le domaine de la pensée.* »

En 1914 on a réalisé des expériences qui confirmaient *directement* que l'atome ne pouvait modifier son énergie que de quantités bien déterminées. Il s'agit des expériences bien connues de Franck et Hertz où l'on mesurait la part de l'énergie des électrons qui est consommée pour exciter des atomes de mercure.

En 1915-1916 Sommerfeld développa la théorie de Bohr. Il étendit notamment la méthode de quantification au cas de systèmes ayant plus d'un degré de liberté en passant du cas des orbites circulaires à celui d'orbites elliptiques ; il établit également la précession d'une orbite elliptique dans le plan de cette orbite. En 1916 Debye et Sommerfeld conclurent à la quantification de la composante du moment dirigée suivant la direction d'un champ magnétique. C'est ainsi que fut introduit le concept de *quantification spatiale* qui fut brillamment confirmé en 1921 par les expériences de Stern et Gerlach sur le dédoublement des pinceaux atomiques sous l'action de champs magnétiques non homogènes.

Continuant à développer la théorie quantique des atomes, Bohr formula en 1918 (dans un article intitulé « Contribution à la nature quantique des spectres linéaires ») le *principe de correspondance* qu'il utilisait en fait depuis 1913. Selon ce principe les lois de la mécanique quantique doivent se réduire aux lois de la mécanique classique lorsque les nombres quantiques du système ont de grandes valeurs, ce qui revient à dire lorsque la valeur relative du quantum d'action devient négligeable. Il s'ensuit que la physique classique joua par principe un rôle important dans la découverte des lois de la mécanique quantique.

La période qui s'étend de 1913 à 1920 restera dans l'histoire comme la période d'établissement et de développement de la théorie quan-

tique de Bohr. Les succès de cette théorie sont indubitables ; elle représente l'étape la plus importante de l'histoire de l'élaboration de la mécanique quantique. Cependant à mesure que la théorie de Bohr se développait, se faisaient de plus en plus sentir ses contradictions internes, grandement déterminées par les contradictions inhérentes à l'idée même de la quantification, à l'idée des « sauts quantiques » (cf. § 2). L'état de crise de la théorie se manifestait de plus en plus nettement. Il fallait surmonter cette crise pour que la théorie puisse continuer à se développer ; un apport d'idées nouvelles devenait indispensable. Nous avons mentionné au § 2 que la levée de ces contradictions a été assurée par l'idée du dualisme onde-corpuscule. L'idée du dualisme, ayant levé les contradictions de la « vieille théorie quantique », a marqué les débuts de l'étape d'un développement véritable de la mécanique quantique en tant que théorie physique, en la dotant d'un appareil adéquat ; la conséquence en a été la résolution d'un grand nombre de problèmes de la physique atomique et de la physique du noyau atomique.

Etablissement de la mécanique quantique (1923-1927). En 1923 Compton a découvert l'effet désigné par la suite effet Compton, qui consistait en une diminution de la longueur d'onde des rayons X diffusés par la matière. Cet effet apportait une preuve évidente de ce que les rayonnements possédaient en plus des propriétés ondulatoires, des propriétés corpusculaires. Les quanta de lumière considérés comme des particules élémentaires furent définitivement inclus dans la physique sous le nom de *photons*.

En 1923-1924 L. De Broglie, dans sa thèse de doctorat « Recherches sur la théorie des quanta », a suggéré d'étendre l'idée du dualisme onde-corpuscule à toutes les microparticules en associant à toute microparticule aussi bien des propriétés de corpuscule que des propriétés d'onde (cf. § 2). Plus tard (1927) l'idée du dualisme a trouvé une confirmation particulièrement convaincante dans les expériences de diffraction des électrons, qui ont été réalisées simultanément dans plusieurs laboratoires. En 1925 De Broglie a introduit la notion d'« ondes de matière », caractérisées par une *fonction d'onde*.

La synthèse de l'idée de la quantification et de l'idée du dualisme onde-corpuscule a été extrêmement fructueuse pour le développement de la mécanique quantique. Au cours des années 1925-1926 a été créé l'essentiel de l'*appareil* de la mécanique quantique. Le premier pas a été fait en 1925 par Heisenberg qui proposa de représenter toutes les variables dynamiques quantifiées sous forme d'une *matrice*, dont les éléments diagonaux sont les valeurs expérimentales de la variable concernée (le lecteur connaît cette approche dont des exemples sont donnés par la matrice de Hamilton, ou matrice énergétique, que nous avons considérée dans cet ouvrage. Pour établir des corrélations entre les différentes matrices, Heisenberg utilisait les corrélations classiques entre les variables dynamiques en mettant

à profit le principe de correspondance; il notait cependant que le produit des matrices utilisées pouvait ne pas être commutatif. En 1926 dans un mémoire intitulé « La quantification considérée comme un problème de valeurs propres » Schrödinger, utilisant les conceptions ondulatoires, a avancé sa fameuse équation différentielle pour la fonction d'onde (connue sous le nom d'*équation de Schrödinger*). Schrödinger ramenait le problème du calcul des niveaux d'énergie d'une microparticule liée à celui du calcul des valeurs propres.

Aussitôt après la publication du mémoire de Schrödinger on pouvait penser qu'il existait alors deux théories indépendantes: la *mécanique ondulatoire* de Schrödinger et la *mécanique matricielle* de Heisenberg. Cependant dès 1926 Schrödinger a montré que les deux théories étaient en fait équivalentes, étant deux formes d'expression différentes des mêmes concepts.

On doit noter que le formalisme ondulatoire de Schrödinger avait la préférence, puisqu'il permettait de résoudre les problèmes de la mécanique quantique à l'aide de l'appareil bien élaboré de la *physique mathématique*. A ce propos il est opportun de citer un commentaire de Planck sur l'équation de Schrödinger [46] : « *L'importance fondamentale de cette équation différentielle tient non pas au procédé utilisé pour l'établir, ni à son interprétation physique, qui dans ses détails n'est pas encore parfaitement claire, mais bien à ce que l'introduction de la loi quantique dans la forme connue d'une équation différentielle usuelle donne naissance à une méthode absolument nouvelle permettant à l'aide de mathématiques de maîtriser un problème de théorie quantique extrêmement ardu. C'est la première fois qu'on a réussi à faire figurer dans une équation différentielle ce quantum d'action qu'on n'arrivait pas jusqu'alors à traiter du point de vue de la physique du continu.* »

Tandis que le formalisme de la théorie de Schrödinger a été reconnu aussitôt qu'il fut connu, les questions concernant l'interprétation de la mécanique ondulatoire et le contenu physique du concept de « fonction d'onde » ont fait l'objet de débats passionnés pendant de longues années. En 1926 Born a avancé une interprétation probabiliste de la fonction d'onde ; et les « ondes de matière » ont cédé leur place à des « ondes de probabilité ». On avait déjà bien compris à cette époque qu'il était illusoire de vouloir interpréter la fonction d'onde comme l'amplitude d'un champ matériel (tel le champ électromagnétique ou le champ de gravitation). Parlant de la fonction d'onde, Planck écrivait en 1928 dans [46] : « *Le fait que cette grandeur ne peut être concrétisée dans le sens usuel et qu'elle ne peut avoir qu'une signification indirecte, proprement symbolique, découle de ce que les ondes se propagent non pas dans un espace tridimensionnel usuel, mais dans un espace dit de configuration dont les dimensions sont déterminées par le nombre de degrés de liberté du système considéré.* » Cela signifie que les ondes de De Broglie ne peuvent être assimilées à des ondes classiques.

Un nouveau pas important dans le développement de la mécanique quantique, contribuant à dégager son contenu physico-philosophique, a été fait en 1927, lorsque Heisenberg introduisit dans la théorie ses *relations d'incertitude*; ce faisant, il précisa de quelle manière on devait utiliser les concepts d'énergie, d'impulsion, de coordonnées, etc. lorsqu'il s'agissait de microparticules (cf. § 3). L'introduction des relations d'incertitude signifiait une rupture définitive avec le déterminisme classique et la mécanique quantique devait dorénavant être considérée comme une *théorie statistique*. Au cours de cette même année Bohr, partant des relations d'incertitude, formula l'une des plus importantes révélations du XXe siècle — le *principe de complémentarité* (cf. § 16).

Il est indubitable que les années 20 de notre siècle ont été la période d'un développement intensif de la mécanique quantique. Il nous est impossible de citer ici toutes les recherches importantes de cette période, aussi nous contenterons-nous d'énumérer quelques-uns des résultats majeurs:

1924 — Pauli propose d'attribuer à l'électron un quatrième degré de liberté pouvant assumer deux valeurs distinctes; mettant à profit cette idée de Pauli, Uhlenbeck et Goudsmit conçoivent l'idée d'un électron tournant sur lui-même (autrement dit, le concept de *spin*).

1924 — Bose entreprend une série d'études fondamentales sur la base desquelles Einstein crée une théorie statistique des photons, qui recevra plus tard le nom de *statistique de Bose-Einstein*; dans le cadre de cette nouvelle théorie, la formule de Planck pour le rayonnement du corps noir trouve enfin sa pleine justification.

1925 — Pauli formule son célèbre *principe d'exclusion* pour les électrons.

1925 — Born et Jordan mettent la théorie de Heisenberg sous une forme matricielle.

1925 — Dirac développe une théorie *relativiste* de l'électron et des atomes d'hydrogène.

1926 — Fermi et Dirac publient une étude fondamentale sur la théorie statistique des électrons, qui recevra plus tard le nom de *statistique de Fermi-Dirac*.

Il est bien évident que l'histoire de la constitution de la mécanique quantique ne s'arrête pas en 1927. Au cours des années suivantes elle s'assimile de nouvelles méthodes, de nouveaux domaines d'application et surtout elle s'enrichit de nouvelles recherches sur son contenu physique et philosophique. Certains problèmes (et en premier lieu le problème des mesures quanto-mécaniques) font l'objet de recherches de nos jours encore. Nous arrêtons cependant notre bref aperçu à l'année 1927, considérant que l'exposé de l'histoire ultérieure de la mécanique quantique nécessite une étude spéciale.

Les lecteurs qui voudraient étudier plus profondément l'histoire du développement et de la constitution de la mécanique quantique auront avantage à consulter les ouvrages [47-50].

BIBLIOGRAPHIE

1. ФОК В. А. Об интерпретации квантовой механики. В сб-ке « Философские вопросы современной физики ». М., Изд-во АН СССР, 1959.
2. ЛЭМБ У. Измерения в квантовомеханических системах и интерпретация нерелятивистской квантовой механики.— УФН, т. 99 (1969), с. 719.
3. FEYNMAN R., LEIGHTON R. a.o. The Feynman Lectures of Physics. Vol. 8, London, 1963.
4. FEYNMAN R., LEIGHTON R. a.o. The Feynman Lectures of Physics. Vol. 9, London, 1963.
5. FEYNMAN R., HIBBS A. Quantum Mechanics and Path Integral, New York, 1965.
6. BOHR N. Atomic physics and human knowledge, New York, Wiley; London, Chapman and Hall, 1958.
7. ФОК В. А. Начала квантовой механики. Л., « Кубуч », 1932.
8. PAULI W. Principes généraux de la mécanique quantique. Trad. de l'allemand. M.-L., GITTL, 1947.
9. DIRAC P. The principles of quantum mechanics. Oxford, 1958.
10. LANDAU L., LIFCHITZ E. Mécanique quantique. Théorie non relativiste. Editions Mir, Moscou, 1974.
11. BLOKHINTSEV D. Principes de la mécanique quantique. Editions Mir, Moscou, 1950.
12. FERMI E. Notes on Quantum Mecanics, New York, 1961.
13. SCHIFF L. Quantum mechanics, New York, 1955.
14. BORN M. Physics in my generation, London-New York, Pergamon press, 1956.
15. LAPLACE P. Essai philosophique sur les probabilités. Paris, Courcier 1816.
16. LANGEVIN P. La notion de corpuscules et d'atomes. Paris, Hermann, 1934.
17. САВЕЛЬЕВ И. В. Курс общей физики. т. 3, М., « Наука », 1968.
18. РОЗЕНФЕЛЬД Л., РЮДИНГЕР Э. Годы перелома. В сб. « Нильс Бор — жизнь и творчество ». М., « Наука », 1967.
19. БОР Н. Воспоминания о Резерфорде — основоположнике науки о ядре.— УФН, т. 80 (1963), с. 219.
20. ГЕЙЗЕНБЕРГ В. Открытие Планка и основные философские проблемы атомной теории.— УФН, т. 66 (1958), с. 163.
21. HEISENBERG W. Die physikalische Prinzipien der Quantentheorie. Leipzig, Herzel, 1941,
22. ВАВИЛОВ В. С. Действие излучений на полупроводники. М., Физматгиз, 1963.
23. L. DE BROGLIE. Introduction à l'étude de la mécanique ondulatoire. Paris, Hermann, 1930.

24. ТАРАСОВ Л. В. О длине волны электрона в потенциальной яме. Сб. « Физика », вып. 2. МВ ССО СССР. М., « Высшая школа », 1972.
25. BOHM D. Causality and chance in modern physics. London, 1957.
26. COOPER L. An Introduction to the Meaning and Structure of Physics, v. 2, New York, 1970.
27. МЯКИШЕВ Г. Я. Динамические и статистические закономерности в физике. М., « Наука », 1973.
28. BOHM D. Quantum theory. New York, 1952.
29. ВАВИЛОВ С. И. Ленин и физика (сб. статей). М., Изд-во АН СССР, 1960.
30. TRIGG G. Crucial Experiments in Modern Physics. New York, 1971.
31. ГЕЛЬФЕР Я. М., ЛЮБОШИЦ В. Л., ПОДГОРЕЦКИЙ М. И. Парадокс Гиббса и тождественность в квантовой механике. М., « Наука », 1975.
32. БЛОХИНЦЕВ Д. И. Принципиальные вопросы квантовой механики. М., « Наука », 1966.
33. БОР Н. О понятиях причинности и дополнительности. Избранные труды, т. 2. М., « Наука », 1971.
34. КОГАН В. И., ГАЛИЦКИЙ В. М. Сборник задач по квантовой механике, М., ГИТТЛ, 1956.
35. FLÜGGE S. Practical Quantum Mechanics. Berlin, Springer 1971.
36. СМИРНОВ В. И. Курс высшей математики, т. 3, ч. 2, М., « Наука », 1969.
37. ЛЕБЕДЕВ Н. Н. Специальные функции и их приложения М., Гостехиздат, 1953.
38. LANDAU L., LIFCHITZ E. Théorie des champs. Editions Mir, Moscou, 1970.
39. ZIMAN J. Principles of the Theory of Solids. Cambridge, 1964.
40. JONES H. The Theory of Brillouin Zones and Electronic States in Crystals. Amsterdam, 1962.
41. ТАРАСОВ Л. В. Физические основы квантовой электроники. М., « Сов. радио », 1976.
42. WIGNER E. Symmetries and Reflections. Scientific Essays. Bloomington-London, 1967.
43. ЛЕНИН В. И. Материализм и эмпириокритицизм. Гос. изд-во политической литературы, 1953.
44. PLANCK M. L'image du monde dans la physique moderne. Trad de l'allem. Paris, Cauthier, 1963.
45. ЭЙНШТЕЙН А. Сб. статей «Физика и реальность». М., «Наука», 1965.
46. ПЛАНК М. О работах Шредингера по волновой механике. Избранные труды. М., « Наука », 1975.
47. ФРАНКФУРТ У. И., ФРЕНК А. М. У истоков квантовой теории. М., « Наука », 1975.
48. ЗОММЕРФЕЛЬД А. Сб. статей « Пути познания в науке » М., « Наука », 1973.
49. БОР Н. Сольвеевские конгрессы и развитие квантовой физики.— УФН, т. 91 (1967), с. 737.
50. Под ред. Я. А. СМОРОДИНСКОГО. Сб. статей « Теоретическая физика 20 века ». М., ИЛ, 1962.
51. ПОДГОРЕЦКИЙ М. И. Постоянная Планка $\hbar$ и принцип дополнительности в квантовой механике — Сб. « Принцип дополнительности и материалистическая диалектика ». М., « Наука », 1976.

INDEX ALPHABÉTIQUE

Amplitude de densité de probabilité, 131
Amplitude d'état, 93
— —, équation fondamentale, 116, 118, 161
— —, équation fondamentale donnée sous une forme indépendante du choix des états de base, 162
— —, variation dans le temps, 119-121
— de probabilité d'une transition, 74, 93
— — —, principales règles de travail, 75, 99-101
— de transition, 93
Amplitudes de projection, 125-127
Analogie vectorielle, 163, 226
Analyseur, 102-105
Approximation adiabatique, 200, 202
Atome d'hydrogène, théorie rigoureuse, 50, 198

Bandes d'énergie, 209-212, 216
Bosons, 17, 86

Caractère statistique de la mécanique quantique, 114
Coefficient de réflexion de la barrière, 196
— de traversée de la barrière, 196-197
Collectif statistique, 114
Commutation des opérateurs, 159, 177
— —, loi de conservation, 170
Comportement de l'électron dans un champ magnétique, 124-130
Constante de Planck, 16, 24, 30, 31
— —, rôle joué en mécanique quantique, 30, 183
— de Rydberg, 23, 25
Contradictions inhérentes aux transitions quantiques, 27, 38
« Crise de la physique », 229, 230

Dégénérescence, 154
— des niveaux d'énergie, 199, 200
— — —, levée de la dégénérescence, 200, 216
— commutative des niveaux d'énergie, 216
Destruction de la superposition, 104
Détecteur, 104-107
Déterminisme classique, 10, 11
Diagonalisation de la matrice de Hamilton, 121
Diagrammes de Feynman, 55, 221
Diffusion de microparticules, 72, 82-85
— des neutrons par un cristal, 88-90
— — —, cohérente, 90
— — —, non cohérente, 90
Discernabilité, 76, 78, 82
— partielle, 82, 95
Dualisme onde-corpuscule, 28, 49

Effet Compton, 29
— Franz-Keldych, 42
— Stark, 200
— tunnel, 44, 195
— Zeeman, 200
Electron soumis à l'action d'un champ périodique, 211-217
Emission de la lumière, induite, 87
— —, spontanée, 87
Ensemble complet de grandeurs, 36, 95

Equation de Schrödinger, 175, 184, 192, 204
— — dans la représentation en énergie, 219
— — dans la représentation en impulsion, 206, 207
— — dépendante du temps, 176, 184, 193
— — — —, utilisée en hydrodynamique, 192-194
— —, indépendante du temps, 176
Etats de base, 138
— — de la microparticule, 97
— de la microparticule, états mutuellement orthogonaux, 95
— —, passage d'un état à un autre, 121
— des microparticules, 35-38, 92
— stationnaires, 24, 118, 120, 176
Expérience de Young, 64

Fermions, 17, 86
Fonction delta, 135
— — de Dirac, 133
— d'onde, 131-135
— — d'un électron au sein d'un cristal (fonction de Bloch), 203, 212-213
— — d'une microparticule en mouvement libre, 134, 175
Fonctions associées de Legendre, 181
— sphériques, 181, 191, 198
Formule de De Broglie, 29

Hamiltonien, 166, 197-204
— de l'atome d'hydrogène, 198
— — —, fonctions propres, 198
— — —, valeurs propres, 198
— d'un cristal, 200-203
— —, approximation adiabatique, 200
— —, approximation monoélectronique, 202
— d'interaction d'un électron avec un rayonnement électromagnétique, 203
— de l'oscillateur, 197
— — fonctions propres, 198
— — valeurs propres, 198
— d'un oscillateur dans la représentation en impulsion, 207
Hypothèse de De Broglie, 29
— de Planck, 24

Identité des microparticules, 52
Indiscernabilité, 53, 82
Instabilité des microparticules, 17, 18
Intégrales de mouvement, 21, 170
— le long de trajectoires de Feynman, 90
Interférence des amplitudes de diffusion 84
— des amplitudes de probabilité, 77, 80
— — —, anéantissement, 78
— — —, bosons et fermions, 85
— — —, diffusion des microparticules, 82, 89
— des amplitudes de transition, superposition des états, 98
— des microparticules, 64-67
— —, destruction, 68-69
Invariance unitaire, 172
Invariants unitaires, 158, 172

Matrice de l'opérateur, 153
— de Hamilton, 116, 118
— —, choix des états de base, 160
— —, rôle des éléments non diagonaux, 118, 120
— — d'un électron placé dans un champ magnétique, 124
Matrices de spin de Pauli, 130
Méthode de perturbation, 219, 220
Microparticule placée dans un puits de potentiel à parois de hauteur infinie, 185
— placée dans un puits de potentiel à parois de hauteur infinie, valeurs probables de l'impulsion, 207
— placée dans un puits de potentiel de profondeur finie, 186-190
Microparticules, caractéristiques et propriétés, 14
— dans un interféromètre, 63, 79
— virtuelles, 55
Modèle de l'atome d'hydrogène de Bohr, 24
Modèles représentatifs des microparticules, 46-52, 59-61
Molécule d'ammoniac, 117, 123
— — soumise à l'action d'un champ électrique, 123

Nombres quantiques, 26, 36, 50, 181
Notion de probabilité en mécanique quantique, 54, 113, 138, 227
Noyau de l'opérateur, 153
Nuage électronique, 50

Onde-pilote, 48
Opérateur, spectre de valeurs propres, 154
— du carré du moment, 176, 177
— — —, fonctions propres, 181, 191
— — —, valeurs propres, 181, 191
— conjugué, 153
— conjugué complexe, 153
— de la coordonnée, 173, 206
— hermitien (auto-conjugué), 153
— — dans sa représentation propre, 156
— —, principales propriétés, 154-156
— de l'impulsion, 174, 204
— —, fonctions propres, 174
— de l'inversion, 179
— linéaire, 152
— de la projection du moment, fonctions propres, 154
— — —, valeurs propres, 180
— transposé, 153
— unitaire, 153
— —, passage d'une représentation à une autre, 157
Opérateurs en mécanique quantique, 151, 167-173
— — —, relations de permutation, 177-179
Oscillations de point zéro, 41

Paquet d'onde, 31
Parité, 179
— spatiale, 37, 179, 181
Particule soumise à l'action d'un champ de symétrie sphérique, 190-192
Passage d'un faisceau lumineux à travers un polariseur, 69, 97
— d'une particule au-dessus d'une barrière de potentiel, 195
— — au travers d'une barrière, 195-197
Photons virtuels, 55
Polarisation du photon, 37, 70
— du vide, 57
Polynômes généralisés de Laguerre, 199
— d'Hermite, 198
— de Legendre, 181
Potentiel de Kronig-Penney, 213
Précession du spin, 127
Principe de causalité, 115
— — en mécanique quantique, 111-113, 115
— de combinaison de Ritz, 23
— de complémentarité, 144
Principe de correspondance, 233
— d'interdiction de Pauli, 17
— de la réversibilité microscopique, 88
Principes de superposition des états, 92-93
Probabilité en mécanique quantique, 139
Processus de mesure en mécanique quantique, 104-107
— — — —, certaines particularités, 105
— — — —, rôle de l'analyseur, 104
— — — —, rôle du détecteur, 104

Quantification, 22
— du moment, 26, 180

Réduction du paquet d'onde, 105
Règle des fréquences de Bohr, 24
Relations d'incertitude, 32
— —, diffraction des microparticules, 34
— —, estimation de l'énergie de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène, 40
— —, estimation de l'énergie des oscillations de point zéro d'un oscillateur, 41
— —, estimation du flou du bord de la bande d'absorption optique dans l'effet Franz-Keldych, 42
— —, trajectoires des microparticules, 43
Représentation en coordonnées, 134, 173
— en énergie, 219
— de Heisenberg, 223, 224, 226
— en impulsion, 134, 204
— d'interaction, 225-226
—, passage de la représentation en coordonnées à la représentation en impulsion, 204-206
— propre, 156
— de Schrödinger, 222
Représentations, 97, 156
Rôle du détecteur, 106

Série de Balmer, 23
— de Lyman, 23
— de Paschen, 23
Spin, 16, 26
Superposition des états, 91-95
— —, discernabilité complète et partielle, 95

Superposition des états, indétermination des résultats de mesure, 94
— —, passage d'un état à un autre, 118, 161, 204
— —, passage des photons à travers les polariseurs, 97-98
— —, rôle de l'analyseur, 102
— —, transitions quantiques, 94, 217

Théorèmes d'Ehrenfest, 183
Transition quantique, 22, 38, 94
Transitions quantiques, calcul des probabilités de transition, 221
Transitions virtuelles, 38, 55
Transmutations des particules élémentaires, 19, 20

Valeur moyenne d'une grandeur physique, 165, 170
— — — —, variation dans le temps, 171
Vecteur de densité de flux de probabilité, 194
Vecteur de l'état, 130

Zones de Brillouin, 211

TABLE DES MATIÈRES

Avant-propos 5
Intermède. Le système des conceptions de la physique classique est-il d'une logique parfaite? 10

Chapitre I. La spécificité de la physique des microparticules 15

§ 1. Caractéristiques et propriétés des microparticules 15
§ 2. Deux concepts fondamentaux de la mécanique quantique 22
§ 3. Les relations d'incertitude 31
§ 4. Quelques résultats qu'impliquent les relations d'incertitude . . 40
§ 5. De l'impossibilité d'une interprétation classique du comportement des microparticules 46
§ 6. Le rejet des conceptions de la physique classique 52

Intermède: Peut-on élaborer un modèle représentatif de microparticule? 59

Chapitre II. Les fondements physiques de la mécanique quantique . . 62

§ 7. Description de certaines expériences ayant une importance de principe 62
Un petit intermède 69
§ 8. Les amplitudes de probabilité des transitions quantiques (formulation des principes fondamentaux) 74
§ 9. Les amplitudes de probabilité des transitions (démonstration des principes généraux) 79
§ 10. Le principe de superposition des états 91
§ 11. Les mesures en mécanique quantique 101

Intermède: De quelles ondes s'agit-il? Retour sur le concept d'ondes en mécanique quantique. 109

§ 12. Le principe de causalité en mécanique quantique 111
§ 13. Microparticules ne disposant que de deux états de base 117
Un bref intermède 119
§ 14. Comportement de l'électron dans un champ magnétique 124
§ 15. La fonction d'onde 131
§ 16. La mécanique quantique représente un bond qualitatif dans la connaissance des lois de la nature 135
Un bref intermède 143

Intermède: Y a-t-il opposition entre les conceptions de la mécanique quantique et le « bon sens »? 148

Chapitre III. Les opérateurs linéaires en mécanique quantique . . . 151

§ 17. Fondement de la théorie des opérateurs linéaires 152

§ 18. De la matrice de Hamilton à l'opérateur de l'énergie 160
§ 19. Les opérateurs linéaires en mécanique quantique 167
§ 20. Bases de l'appareil de la mécanique quantique dans la représentation en coordonnées 173
§ 21. La mise en œuvre de l'équation de Schrödinger 184
§ 22. Formes du hamiltonien dans quelques problèmes particuliers 197
§ 23. Utilisation de la représentation en impulsion 204
§ 24. L'électron dans un champ périodique 209
§ 25. Probabilités des transitions quantiques 217
§ 26. Procédés utilisés pour décrire l'évolution dans le temps des microsystèmes 222

Notes sur l'histoire de la naissance et du développement de la mécanique quantique 228

Bibliographie 237

Index alphabétique 239

A NOS LECTEURS

Les Editions Mir vous seraient très reconnaissantes de bien vouloir leur communiquer votre opinion sur le contenu de ce livre, sa traduction et sa présentation, ainsi que toute autre suggestion.

Notre adresse :
Editions Mir
2, Pervi Rijski péréoulok
Moscou, I-110, GSP, U.R.S.S.

Imprimé en Union Soviétique